

博士論文

Doctorate Dissertation

量子情報処理のための量子ダイナミクスの

ロバスト制御

(Robust control of quantum dynamics for
quantum information processing)

平成 30 年 12 月博士（理学）申請

A Dissertation Submitted for Degree of Doctor of Science

December 2018

東京大学大学院理学系研究科物理学専攻

Department of Physics, Graduate School of Science,

The University of Tokyo

坂井 亮介

Ryosuke Sakai

Abstract

(和文)

物理系に対する量子ゲートの実装は多くの場合で量子ダイナミクスの制御によって実現される。量子ゲートとは量子ビット（2準位）系に作用するユニタリ演算子であり、量子情報処理の中で実行される状態変換の1つである。量子ダイナミクスは系のハミルトニアンが与えられたときに Schrödinger 方程式に従う時間発展のことであり、ハミルトニアンを人為的に操作できる場合では、その操作性からダイナミクスを制御することができる。系のハミルトニアンのパラメータの値が完全にわかっている場合は、量子ダイナミクスの制御理論によってどのような量子ゲートの集合が原理的に実行できるかが明らかになっている。しかし、多くの現実の物理系では系に対する正確な測定の難しさや、その不安定さからハミルトニアンに不定となるパラメータが含まれることがあり、ハミルトニアンを完全に知ることは困難である。ハミルトニアンに不定性（未知パラメータ）がある場合では一般にパラメータの値に応じて実装される量子ダイナミクスが異なり、そのままでは目的の量子ゲートの実行はできない。しかし、このような状況でも目的の量子ゲートが実装できることが望まれる。そこで本研究では系のハミルトニアンにある種の不定性がある場合に、その不定性に対してロバストに目的の量子ゲートの実装が可能であるか、つまりハミルトニアンの違いを無効化することができるかを解析する。

Lie 代数的アプローチを用いたこれまでの研究によって、ハミルトニアンの一部に不定性がある 1 量子ビット系に関してはロバスト制御可能な系が存在することが解析的に示されていたが、それより大きい次元の系については明らかにされていなかった。そこで本研究では、Lie 代数的アプローチを 1 量子ビット系より大きな次元を持った量子系に拡張することで、このような系に対するロバスト制御が可能であるかについて解析的に証明する。特に 2 量子ビット系の量子ゲートは一般的な量子情報処理を実行するのに不可欠であることから、この解析は量子情報処理が実行できるデバイスの実現に向けた研究に役立つと期待される。

本論文では、始めに不定性を持つ 2 量子ビット系のハミルトニアンをいくつか挙げ、それぞれのハミルトニアンの不定性に対してロバスト制御が可能であるかを解析的に示す。特にハミルトニアンの不定性が 2 量子ビット系の部分系 (1 量子ビット系) に対する局所的な項に含まれる場合や、2 量子ビットの相互作用となる項に含まれる場合などを扱う。また複数の不定なパラメータを持つ系に対するロバスト制御が可能となりうるかについても解析的に示す。

一方で、不定性に対するロバスト制御が可能であるか解析的な手法では明らかにならない系も存在する。本研究ではこのような系に対して数値解析を用いてロバスト制御可能性を分析する。

最後に特別な仮定の下で、 d 次元の複数の不定性を持つハミルトニアン系に対するロバスト制御が可能であることを示すための方法論を提示し、具体的な系を用いて、この方法論に基づいて不定性に対するロバスト制御が可能となる場合が存在することを示す。

(English)

Quantum gates are usually implemented in physical systems by controlling the Hamiltonian dynamics of the systems. Quantum gates are unitary operators acting on qubit (2-dimensional) systems, and they are one of the building blocks for quantum information processing. Quantum dynamics is a time-evolution described by the Schrödinger equation with its own Hamiltonian, and when the Hamiltonian is controllable, we can also control the dynamics. If full descriptions parameters of the Hamiltonians are available, the set of implementable quantum gates is obtained by control theory of quantum dynamics in principle. In many systems, however, the Hamiltonians may contain unknown parameters due to the difficulty of precise measurements or instability of the system, and therefore it is hard to know the full descriptions. Different Hamiltonians generate different quantum dynamics in general, and thus the target quantum gate we want to perform is unimplementable under the uncertainty of the Hamiltonian due to the difference. However, we still want to perform our target quantum gate in these situations. In this thesis, we investigate the existence of controls which are robust against the uncertainty, i.e., nullifying the difference of Hamiltonians.

In a single-qubit system, it is analytically shown that there exist systems robustly controlled against such uncertainty in a part of their Hamiltonians by using the Lie algebraic approach, but the robust control for larger systems had been open. In this thesis, we will analytically show that the robust control is implementable for certain systems which is larger than a single-qubit system by extending the Lie algebraic approach for larger systems. Since a two-qubit gate is an essential element for performing quantum information processing, the obtained result will help for realizing quantum devices which can perform such information processing.

At first, we will present several two-qubit systems that can be analytically realizing their robust controllability against the uncertainty of their Hamiltonians. In particular, we will deal with the cases that a uncertain parameter is on a local (single-qubit) part or on a two-qubit interaction part of the Hamiltonian. The robust controllability for systems which contain multiple uncertain parameters is also investigated by the analytical approaches.

On the other hand, there exist systems that the robust controllability against an

uncertain parameter is unclear by the analytical approach. In this thesis, the robust controllability of such systems are also investigated by applying numerical approach.

Finally, we will present a method to show the robust controllability of generate d -dimensional systems which certain multiple uncertain parameters under a particular assumption, and show the robust controllability against uncertainty of certain types of systems by that method.

目次

第 1 章	導入	1
1.1	量子情報処理	1
1.2	量子ダイナミクスの制御	4
1.3	本論文の構成	6
1.4	用語解説	7
第 2 章	準備	9
2.1	Lie 代数の基礎と量子ダイナミクスの制御理論	10
2.1.1	群と Lie 代数	10
2.1.2	量子ダイナミクスの制御理論	13
2.2	量子系のロバスト制御	22
2.2.1	アンサンブル制御	23
2.2.2	ハミルトニアンの違いによるエラーの上界	26
2.2.3	1 量子ビット系への連続不定定数に対するロバスト制御	28
2.3	数値解析よる制御パルスの最適化アルゴリズム	32
2.3.1	GRAPE アルゴリズム	33
2.3.2	QuTiP とその他のアルゴリズム	36
第 3 章	2 量子ビットに対するロバスト制御	38
3.1	多項式近似を用いたロバスト制御可能性の証明	38
3.1.1	連続不定定数に対するロバスト制御が可能な系とその証明	39
3.1.2	連続不定定数に対するロバスト制御可能性が不明瞭な系	45
3.1.3	単純代数ではない系のロバスト制御	47
3.1.4	ロバスト制御に要する時間	53
3.2	ロバスト制御の数値解析	59

3.2.1	GRAPE アルゴリズムによるロバスト制御パルスの探索	59
3.2.2	ロバスト制御の最小操作時間の数値解析	63
第 4 章	ドリフトハミルトニアンを持たない d 次元系に対するロバスト制御	70
4.1	不定定数を 1 つ持つ系へのロバスト制御	71
4.2	不定定数を複数持つ系へのロバスト制御	75
第 5 章	結論	80
	参考文献	84
付録 A	第 2 章の補助	91
A.1	Example 2.3 に関する補足	91
A.2	Theorem 2.2 の証明	92
付録 B	第 3 章の補助	95
B.1	Example 3.2 の制御性	95
B.2	Example 3.5 の補助	95
B.3	Corollary 3.1, 3.2 の証明	96
付録 C	数値解析の補足データ	99
C.1	最適化された制御パルスのデータ	99
C.2	Qutip のパッケージに入力した詳しい条件値	99

第 1 章

導入

1.1 量子情報処理

量子情報処理とは量子力学に従う物理系を想定した情報処理であり、情報は量子系の状態によって表現され、情報処理は状態に対する変換として量子力学に基づいて記述される。量子状態は互いに直交する古典状態による表現だけでなくこれらの状態の重ね合わせ状態による表現も許される。例えば量子ビットではビットが持つ古典状態“0”と“1”を互いに直交した量子状態によって表すことができ、また一方でこれらの重ね合わせ状態はそれぞれの重みとそれらの間の相対的な位相差といった連続無限量によって表現することができる。1 ビットに対する決定論的な情報操作は“何もしない”か“NOT ゲート ($0 \rightarrow 1, 1 \rightarrow 0$ の変換)”, “全てを 0 にする”, “全てを 1 にする” の 4 種類のみであるが、1 量子ビットに対する一般の決定論的な情報操作は任意の 1 量子ビットの (純粋) 量子状態から任意の他の (純粋) 量子状態への変換を含むため、無限通りの情報操作が存在することになる。従って、古典情報処理によって量子情報処理と同様のタスクを実行することは一般に大きな計算メモリコストがかかることがわかる。本論文では量子状態に対する決定論的な情報操作を量子操作と呼ぶ^{*1}。従って、準備された量子情報を入力とし、この入力に対する量子操作によって得られた出力に確率的な情報操作である量子測定を行う、この一連の流れが一般の量子情報処理となる。(図 1.1)

量子情報科学の分野では大きく分けて 2 つの方向性で研究が進められている。1 つ目は任意の量子状態の準備や量子操作、量子測定が実行できると仮定した上での解析である。

^{*1} 一般的には量子操作には量子測定も含まれるが、図 1.1 にあるように本研究では確率的な操作である量子測定は量子操作に含めないとする。

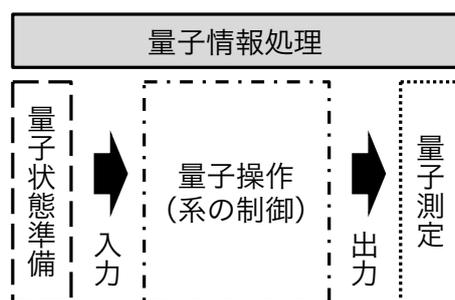


図 1.1 一般的な量子情報処理. 量子状態の準備とその状態を入力とした量子操作を実行し出力する. 最後に量子測定を行うことで量子情報処理が実装される.

量子情報処理によって何が可能で何が不可能であるかを数学的に明らかにすること, または量子情報処理は上記の通り古典情報処理を含んだより幅広い情報操作が実現できることから, 古典情報処理を比較対象として量子情報処理の優位性を解析するなどの研究がされている [1]. 量子情報処理において不可能な量子操作の代表的な例は任意の量子状態に対する複製であり, 量子複製不可能定理 [2] として知られている. 一方, 量子情報処理が古典情報処理より優位であると期待されるのは量子ハミルトニアンダイナミクスのシミュレーションである [3,4]. 量子系の時間発展はハミルトニアンを用いて Schrödinger 方程式によって記述されるが, 多体相互作用している場合は解析的に解くことができず数値的なシミュレーションに頼ることが多い. しかし, 量子系のシミュレーションは系の数に対してパラメータが指数的に増えていくことになり, 古典系を用いた量子系のシミュレーションの障害の一つとなっている. 一方で量子情報処理を用いた量子系のシミュレーションの実装を考えると, 処理自体に量子的な性質を持っているため古典情報処理と比べてシミュレーションの実装が単純化される. もうひとつ興味深い問題としては, 古典情報処理で考えられてきた問題を量子情報処理によって効率化できるかという問題がある. 例えば素因数分解は古典情報処理で桁数に対して効率的に解くことができるアルゴリズムの存在は明らかになっていないが, 量子情報処理を用いたアルゴリズムによって素因数分解を効率的に解けることが示されている [5]. その他にも量子探索アルゴリズム [6] や量子もつれ状態を 2 者間で共有しておくことで直接量子状態を送信することなく量子通信が実行できる量子テレポーテーションプロトコル [7,8], 量子力学の性質によって安全性が保証される量子暗号 [9–11] など提案されている. 以上が量子情報科学の 1 つ目の研究対象とされている問題である.

量子情報科学の研究における 2 つ目の方向性は, 量子情報処理を実装するための量子系を構築することである. 謂わば前者の課題が量子情報処理の需要を作り, 後者はそれ

を供給する役割を担っている。実際の物理系は外からの人為的な制御を加えない限りは一般に目的の量子情報処理を実行しない。そのため量子情報処理をこの物理系で実装するには外部からの制御が必要であるが、上記の通り量子情報処理は多様で連続的なパラメータを持つことから非常に繊細な制御が求められる。これらの課題を踏まえて量子情報処理を実装することができるデバイス（量子コンピュータ）の実現がこの分野における実験的研究が担う大きな役割のひとつである。また同時に、それぞれの実験系における課題を解決するために理論的な解析も行われている。代表的なのは量子誤り訂正 [12–14] であり、量子計算や量子通信を実行する際に起こりうるノイズに対処するために用いられる理論である。このように近年では実験の発展によって量子情報処理の実現が近づいており、理論的な観点からも系の量子操作実現のための提案が重要になってきている。

量子情報処理が有用であり、また量子情報処理が実装できるデバイスの実現に向けて理論的な方向から提案することが重要であることを踏まえて、本研究では量子系に対する制御問題について考える。量子系の制御とは量子状態の準備や量子操作の実現のための制御 [15, 16] を意味するが、本論文では特に量子操作を実現するための量子ダイナミクスの制御問題を扱う*2。制御問題の概要については次節で詳しく取り上げることにする。

有用な量子情報処理を物理系において実装するには多くの場合で量子ダイナミクスの制御が必要となる。最も一般的な量子ダイナミクス制御の活用法として考えられるのは万量子ゲート (universal quantum gates) を構成する量子ゲート [1, 17, 18] の実装手段として用いることである。万量子ゲートの集合は古典の論理回路の NAND ゲートが完全であると同様に、これらの量子ゲートが実装できれば任意の多量子ビット系の量子操作が実行できる量子ゲート集合である。他にもオラクル (oracle) と呼ばれる与えられた問題によって定義される量子操作を導入し、このオラクルの実行回数を計算量の定義とした上で、古典的なアルゴリズムと計算量の比較をすることがある。実際にオラクルが与えられた下で、ハミルトニアンダイナミクスのシミュレーション [19, 20] や半正定値計画問題 [21–23]、量子熱平衡状態の作成 [23]、線形方程式系の解 [24] などを得るための量子アルゴリズムが近年提案され、古典アルゴリズムに対して小さい計算量で実行できることが証明されたことから実用が待たれている。しかし、オラクルの実装法が確立されていない問題もあり、ハミルトニアン制御によって万量子ゲートを介さずにこれらのオラクルを直接実現を目指すことも考えられる。

*2 量子操作を実験的に実現するには、量子ダイナミクスの制御を行う以外に、量子もつれ状態の一種であるグラフ状態と量子測定を組み合わせることで実行する measurement based quantum computer (MBQC) による方法もある。

1.2 量子ダイナミクスの制御

量子ダイナミクスの制御理論は 1970 年代に量子力学の基礎理論として始まり [25, 26], その役割が時代とともに応用の方向へ変わりながら発展してきた理論 [15, 16, 27] である。通常, 時間依存のない固有 (ドリフト) ハミルトニアンを持ったノイズのない閉じた系を仮定しており, この系に対して外部から時間依存する形で制御できるハミルトニアンを加えることで, その系に対してどのような量子操作が“原理的に”実現できるかという問に対して答える理論となっている。制御理論は Lie 代数的な手法によって数学的に量子操作の制御性を明らかにできることから, 与えられたハミルトニアンの下で原理的にどのような量子操作が実行可能であり, 不可能であるかを求めるといった, 量子力学の基礎理論として当初は研究されていた。例えば多体量子ビット系の制御に対して, 数量子ビットに対してのみ制御できるハミルトニアンが与えられた場合の系全体の制御性 [36–38] や開放系に対する制御性 [39, 40] など, ある物理的な制限の下で原理的に実行できる量子操作の集合が何であるか, という一般論が研究されている。しかし, 時代とともに実際に量子系を操作できるようになったことから, 制御の自由度が高い核磁気共鳴 (nuclear magnetic resonance: NMR) における原子核スピン [28, 29] を始めとして, 現在ではダイヤモンド窒素-空孔中心 (NV 中心) の電子や核子 [30–32], 超電導量子ビット [33–35] などの具体的な系を想定した問題に対しても, これらの系をモデル化することで使われる理論となった。

一方で Lie 代数的なアプローチによって制御性を明らかにする方法は, 原理的に制御ができることがわかったとして実際にその制御をどのようにして行うか, または少なくともどれくらいの操作実行時間が必要かについての一般的な解析は困難である場合が多い。制御を実装する方法を見つける問題は, 特別な性質を持った N 量子ビット系や 1, 2 量子ビット系などの一部の場合で明らかにされてきている [41–44]。操作時間の問題は広く量子最適化問題 [15, 16, 27] と呼ばれており, ある評価関数, 例えば操作実行時間 [43, 45–51] や操作中に消費するエネルギー [42, 51, 52] などを最適化する問題については研究が進められている。しかし, 現在のところこれらの解析は最大で 3 量子ビット系までであり, 一般解を解析的に求めるのは非常に困難である。従って, 操作時間の上界を求めることや数値解析を用いた最適操作時間の導出なども行われている [53, 54]。

こうした研究の歴史を踏まえた上で, 近年ではアンサンブル (同時) 制御 [27, 55–58] と呼ばれる新しいタイプの量子制御理論が提案され研究が進展している。アンサンブル

制御とは複数の異なるハミルトニアン系の集団に対して、それぞれ目的の量子操作を同時に実行するような制御である。このとき制御するために外部から加えるハミルトニアンは全ての系に対して同じものを用いるとする。例えば核磁気共鳴 (nuclear magnetic resonance: NMR) における原子核スピンの集団に対して、この集団全体に電磁場を付加することで各原子核スピンを制御する際などに有効であることから提案された [27]。一方で異なるハミルトニアンを持つ量子系の集団に対して同じ量子操作を実行するアンサンブル制御 [27, 59–64] も考えられている。一般に異なるハミルトニアンダイナミクスは異なる量子操作を生成するが、このタイプのアンサンブル制御によって各ハミルトニアンの違いを無効化して目的の量子操作を制御できると解釈することができる。本論文ではこのような制御のことを量子ダイナミクスのロバスト制御と呼ぶことにする。

アンサンブル制御とロバスト制御では想定されている条件が異なっている。アンサンブル制御ではあくまで複数の系を同時に制御することを目的としており、それらの系のハミルトニアンの情報は事前にわかっていることを仮定する。一方でロバスト制御では、パラメータの不定性の大きさはある程度わかっていたとしても、その範囲内では連続的に値を取りうる可能性をもっており、これらの候補のいずれに対してロバストに制御する必要がある [59–62]。当然アンサンブル制御を連続的なパラメータの問題に一般化することはできるが、連続不定定数を持つ系に対する制御の解析は通常アンサンブル制御より複雑な問題となる。最初にこの連続不定定数に対するロバスト制御が可能となる系が存在することを理論的に示したのが Li と Khaneja であり、彼らは多くの 1 量子ビット系でロバスト制御が可能であることを示した [59]。しかしロバスト制御によって量子情報処理を実装したい場合、万能量子ゲートには必ず 2 量子ビット以上の量子ゲートの実現が必要であることから、2 量子ビットゲートのロバスト制御が可能であることを明らかにすることは重要である。また、制御理論の発展のためにも 2 量子ビット以上のロバスト制御が可能であるかどうかを理論的に明らかにすることは重要である。

量子ダイナミクスのロバスト制御が可能であれば、量子情報処理を実装できるデバイスの実現に向けた実験においてもロバスト制御が有用になる可能性がある。例えば NV 中心系の電子スピンは制御できない外界から発生する不定の磁場の影響を受ける。また、NMR の核スピンではそれぞれ不均一性が生じるため系によってハミルトニアンが異なる。従来方法では、これらの不定定数の値を同定した上で目的の操作を実行するフィードバック制御 [16, 27, 65] を行うことで問題の解決を図る必要があった。しかし、ロバスト制御では不定定数の値に関わらず目的の操作が実装できるため、不定定数を明らかにしてから制御する方法と比べて時間短縮できる可能性がある。量子系の制御において時

間とともに起こるデコヒーレンスが問題となることが多いため、より高精度の量子操作の実現にはできるだけ短時間の制御が重要である。また不定定数が緩やかに変化する場合でも、その変化の影響が無視できない程度の時間と制御時間の長さの関係が重要となることがわかる。従って、与えられた系においてロバスト制御が原理的に可能であるかどうかを示すこと、そして、それらの実行方法や実行時間を明らかにすることが重要な課題となる。

本節の最初に述べたとおり、目的の量子制御を実行するために必要な時間の解析的な見積もりは非常に難しい問題である。また制御理論によってその量子操作の原理的な実現可能性が示せたとしても、どのようにして実行するかを示すことは別の問題である。同様にロバスト制御の存在証明がされたところで制御に必要な時間やその具体的な方法の解析は一般的に難しい。しかし、このような問題は数値解析による制御パルスの探索によって解決の糸口とすることができる [53, 54]。この数値解析法は第 2.3 節で詳しく紹介する。本論文では 2 量子ビット系のロバスト制御が原理的に可能となる系の存在を解析的に証明し、また数値解析を用いて制御に要する時間とその方法を明らかにする。さらに、ある特殊な条件下のもとで d 次元の量子系のロバスト制御の可能性を明らかにするための方法を明らかにする。

1.3 本論文の構成

本論文の構成は以下のようになっている。第 2 章で本論文の内容を示す際に必要となる数学的な準備や先行研究の結果をまとめる。第 2.1 節では Lie 代数の定義やその性質、用語などをまとめ、それを用いて量子ダイナミクスの制御理論について述べる。第 2.2 節ではアンサンブル制御や 1 量子ビット系におけるロバスト制御可能性の証明方法などを紹介する。第 2.3 節では量子制御に対する数値的な解析方法について紹介する。その中で、本論文で用いるアルゴリズムを第 2.3.1 項で紹介し、このアルゴリズムの弱点やその他の数値的なアプローチ法などを第 2.3.2 項にまとめる。

第 3 章では本研究内容である 2 量子ビット系に対するロバスト制御の問題を解析する。第 3.1 節では解析的な方法を用いてその制御性を明らかにする。第 3.2 節ではロバスト制御が可能であることが証明された系に対して、その制御法や操作に必要な時間を明らかにするために数値解析を行う。また、ロバスト制御可能性が解析的な方法で示せない系に対して、数値解析を用いてロバスト制御が可能であるかを解析する。

第 4 章では特殊な条件下における d 次元系のロバスト制御の可能性を明らかにするための解析的な方法を構築する。

1.4 用語解説

本節では本論文で用いる記法などについて解説する。

\mathbb{N} や \mathbb{N}_0 , \mathbb{R} , \mathbb{C} をそれぞれ正の整数, 非負の整数, 実数, 複素数の集合とする. また任意の正の整数 $N \in \mathbb{N}$ に対して, $[N] := \{n \mid n = 1, \dots, N\}$ とする. また複素数 $c \in \mathbb{C}$ の複素共役は c^* で表現する.

- 行列に関する記法

行列に対するテンソル積は \otimes で表現し, 例えば2つの 2×2 の行列

$$A := \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}, \quad B := \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix} \quad (1.1)$$

とすると, 行列 A と B のテンソル積は

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}B & a_{12}B \\ a_{21}B & a_{22}B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{12}b_{11} & a_{12}b_{12} \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{12}b_{21} & a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12} & a_{22}b_{11} & a_{22}b_{12} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22} \end{bmatrix} \quad (1.2)$$

となる. また, 行列のエルミート共役は \dagger で表現する. つまり,

$$A^\dagger = \begin{bmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* \\ a_{12}^* & a_{22}^* \end{bmatrix}. \quad (1.3)$$

本論文では歪エルミート行列 (skew-Hermitian matrix) が多く使われる. 歪エルミート行列とは $\bar{A} = -A^\dagger$ を満たすような行列 \bar{A} であり, わかりやすいように上の横棒をつけて表現する.

行列の集合 S に対して $\text{Span}(S)$ は S の要素の任意の実数による線形結合の集合であるとする. つまり

$$\text{Span}(S) = \left\{ \sum_{i=1}^k \lambda_i A_i \mid k \in \mathbb{N}, A_i \in S, \lambda_i \in \mathbb{R} \right\}. \quad (1.4)$$

行列の跡（トレース）は $\text{Tr}(\cdot)$ で表現する．また行列に対するノルムは以下の3つを用いる．

$$\text{トレースノルム：} \quad \|C\|_1 = \text{Tr}(\sqrt{C^\dagger C}), \quad (1.5a)$$

$$\text{Frobenius ノルム：} \quad \|C\|_2 = (\text{Tr}(C^\dagger C))^{\frac{1}{2}}, \quad (1.5b)$$

$$\text{作用素ノルム：} \quad \|C\|_\infty = \sqrt{(C^\dagger C) \text{ の最大固有値}}. \quad (1.5c)$$

ここで、 C は任意の行列である．本論文では、これらのノルムに依らずに定義できる場合や成り立つ等式には下付きを付けずに単に $\|\cdot\|$ と表現することにする．

また、これらのノルムにはユニタリ不変性 [66] がある．つまり、任意の正方行列 A に対して、同じ次元の2つユニタリ行列を U, V とした際に常に

$$\|UAV\| = \|A\| \quad (1.6)$$

が成り立つ．

- 重要な行列（量子ゲート）

エルミートかつユニタリの 2×2 行列（Pauli 行列）を

$$X := \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad Y := \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad Z := \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (1.7)$$

と定義する．量子ゲート X は NOT ゲートになっていることに注意する．これらの量子ゲートに加えて万能量子ゲート [18] を構成する2つの量子ゲートを

$$T := \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{bmatrix}, \quad U_{\text{CNOT}} := \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (1.8)$$

とする．これらはそれぞれ T ゲート（ $\pi/8$ ゲート）と CNOT ゲートと呼ばれる．また、本論文では次元に関わらず恒等行列を $\mathbf{1}$ で表す．

第 2 章

準備

本章では量子ダイナミクスの制御理論及びアンサンブル制御や 1 量子ビット系に対するロバスト制御問題について解説する．制御理論によって系の制御性を明らかにするため，まず系のハミルトニアン $H(t)$ を

$$H(t) = H_d + \sum_{k=1}^K u_k(t) H_c^{(k)} \quad (2.1)$$

として表す．ここで H_d はドリフトハミルトニアンと呼び，外部から変えることができない系もつ固有のものとする．一方で $\{H_c^{(k)}\}_{k=1}^K$ は制御ハミルトニアンと呼び，制御パルス $\{u_k(t)\}_{k=1}^K$ を外部から人為的に操作することによってこの系のダイナミクスに影響を与えることができるとする．本研究では系が完全に閉じていると仮定するため，系の次元を d とすればここで登場するすべてのハミルトニアン $\{H_d, H_c^{(1)}, \dots, H_c^{(K)}\}$ は d 次元エルミート行列によって表現できる．

ハミルトニアンが式 (2.1) で与えられる系の時刻 t_{ini} から t_{fin} への時間発展 $U(t_{\text{ini}}, t_{\text{fin}})$ は Schrödinger 方程式から自然単位系 ($\hbar = 1$) と時間順序演算子 \mathcal{T} を用いて

$$U(t_{\text{ini}}, t_{\text{fin}}) = \mathcal{T} \exp \left\{ -i \int_{t_{\text{ini}}}^{t_{\text{fin}}} H(t) dt \right\} \quad (2.2)$$

となる．本章では式 (2.1) で表わされる系に対して制御パルスを選ぶことによってどのような量子ゲート $U(t_{\text{ini}}, t_{\text{fin}})$ が実行可能になるかを明らかにする．第 2.1 節では通常の制御理論で扱われる，与えられたハミルトニアンの表現が定まっている（既知）である場合を扱う．その際 Lie 代数的なアプローチが役立つため，第 2.1.1 項では Lie 代数の基本的な用語確認や定義を行い，それを用いて第 2.1.2 項で制御理論を紹介する．第 2.2 節では本論文で取り上げるロバスト制御の概念や先行研究の結果について解説する．第

2.3節では前節までに扱った量子ダイナミクスの制御やロバスト制御を実行する制御パルスを見つけるための探索アルゴリズムについて取り上げる。特に本研究で用いるアルゴリズムを第2.3.1項で詳しく解説し、その他のアルゴリズムについては第2.3.2項で紹介する。

2.1 Lie 代数の基礎と量子ダイナミクスの制御理論

本節では系のハミルトニアンが式(2.1)で与えられた場合に実行可能な量子ゲートが何かを明らかにする量子ダイナミクスに関する制御理論（以下では単に量子制御理論と呼ぶ）の解説をする。

2.1.1 群と Lie 代数

量子制御理論では Lie 代数から生成される群 (Lie 群) で実装できる量子ゲートの集合を明らかにすることが可能となる。そのため本項では、本論文で必要となるこれらの定義や性質を確認する [15, 67]。はじめに群と Lie 代数を定義する。

Definition 2.1 - 群 (group) -

群 G は、 G 上の順序対 (ordered pair) に対する二項演算 (binary operation) が定義されている際に（ここでは通常の積のように記号は省略する）以下の性質を満たす。

1. 閉性 (closure):

任意の $f, g \in G$ に対して、

$$h = fg \in G. \quad (2.3)$$

2. 結合則 (associativity):

任意の $f, g, h \in G$ に対して、

$$f(gh) = (fg)h. \quad (2.4)$$

3. 単位元 (identity element):

すべての $f \in G$ に対して、以下を満たす元 (単位元) $e \in G$ が存在する。

$$ef = fe = f. \quad (2.5)$$

4. 逆元 (inverse element):

任意の $f \in G$ に対して、それに対応した以下を満たす元（逆元） $f^{-1} \in G$ が存在する。

$$ff^{-1} = f^{-1}f = e. \quad (2.6)$$

Definition 2.2 - Lie 代数 (Lie algebras) -

ある体 \mathcal{F} 上の Lie 代数 \mathcal{L} は \mathcal{L} の元からなる順序対に対する二項演算: $\mathcal{L} \times \mathcal{L} \rightarrow \mathcal{L}$ が与えられた下でのベクトル空間である。この演算を $[\cdot, \cdot]$ のように表現し、Lie 括弧または Lie 交換子（または単に交換子）と呼ばれ、次のような性質を持つ。

1. 双線型性 (bilinearity):

任意の $\alpha, \beta \in \mathcal{F}$ と $x, y, z \in \mathcal{L}$ に対して,

$$\begin{aligned} [\alpha x + \beta y, z] &= \alpha[x, z] + \beta[y, z], \\ [z, \alpha x + \beta y] &= \alpha[z, x] + \beta[z, y]. \end{aligned} \quad (2.7)$$

2. 交代性 (alternativity):

任意の $x \in \mathcal{L}$ に対して,

$$[x, x] = 0. \quad (2.8)$$

3. Jacobi 恒等式 (Jacobi identity):

任意の $x, y, z \in \mathcal{L}$ に対して,

$$[x, [y, z]] + [z, [x, y]] + [y, [z, x]] = 0. \quad (2.9)$$

本論文では特に行列表現を用いた線形 Lie 代数について考える。つまり、交換子を同じ次元の正方行列 A, B に対して、行列の積の法則を用いて交換子を

$$[A, B] := AB - BA \quad (2.10)$$

のように定義する。要素が実数（複素数）を持つ $n \times n$ の行列の結合則からなる Lie 代数を $\mathfrak{gl}(n, \mathbb{R})$ ($\mathfrak{gl}(n, \mathbb{C})$) と表現し、（複素）一般線形 Lie 代数と呼ばれる。次に部分代数、定義する。

Definition 2.3 - 部分代数 (subalgebras) -

ある Lie 代数 \mathcal{L} が与えられ、 $\mathcal{A} \subset \mathcal{L}$ を考える。 \mathcal{L} で定義される交換子の中で \mathcal{A} が Lie 代数であれば \mathcal{A} は \mathcal{L} の部分代数である。

n 次元の（複素）一般線型 Lie 代数 $\mathfrak{gl}(n, \mathbb{R})$ ($\mathfrak{gl}(n, \mathbb{C})$) の Lie 部分代数を（複素）線型 Lie 代数と呼ぶ．その中で本論文では実数体上の $n \times n$ 歪エルミート行列からなる Lie 代数 $\mathfrak{u}(n)$ ，またはその跡がゼロ (traceless) の Lie 代数 $\mathfrak{su}(n)$ を扱う．このとき，式 (2.1) の $-iH(t)$ は常に $\mathfrak{u}(n)$ の元となり， $H_d, H_c^{(1)}, \dots, H_c^{(K)}$ の跡が全てゼロのときは $-iH(t) \in \mathfrak{su}(n)$ となる．

Example 2.1 $\mathfrak{su}(2)$ は

$$\bar{\sigma}_1 := \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \bar{\sigma}_2 := \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \bar{\sigma}_3 := \frac{1}{2} \begin{bmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{bmatrix} \quad (2.11)$$

で張られる空間である．つまり $\bar{\sigma}_i \in \mathfrak{su}(2)$ であり， $\text{Span}(\{\bar{\sigma}_i\}_{i=1}^3) = \mathfrak{su}(2)$ となる．また， $\bar{\sigma}_i$ 間の関係は完全反対称テンソル ε_{ijk} を用いて

$$[\bar{\sigma}_i, \bar{\sigma}_j] = \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} \bar{\sigma}_k \quad (2.12)$$

となる．これは式 (1.7) で定義した Pauli 行列とそれぞれ

$$\bar{\sigma}_1 := \frac{i}{2} X, \quad \bar{\sigma}_2 := -\frac{i}{2} Y, \quad \bar{\sigma}_3 := \frac{i}{2} Z \quad (2.13)$$

の関係が成り立つことに注意する．以下では特に断りがない限りは X, Y, Z の代わりに主に $\bar{\sigma}_j$ ($j = 1, 2, 3$) を Pauli 行列と呼ぶことにする．

Example 2.1 で紹介した $\mathfrak{su}(2)$ に属する Pauli 行列表現のように与えられた Lie 代数 \mathcal{L} を張る基底の集合を $\text{Basis}(\mathcal{L})$ とする．

\mathcal{A} がある Lie 代数 \mathcal{L} の部分代数であり，任意の \mathcal{A} の元と \mathcal{L} の元の交換子が \mathcal{A} に属する場合，その部分代数 \mathcal{A} を \mathcal{L} の不変部分代数 (invariant subalgebras) と呼ぶ．また， \mathcal{L} が自明でない不変部分代数を持たない場合， \mathcal{L} を単純代数 (simple algebras) と呼ぶ．

与えられた Lie 代数 \mathcal{L} の元 ξ_i の集合 $\Xi = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n\}$ に対して，複数回を含めた Ξ の要素からなる交換子の集合が張る部分代数を Ξ によって生成された Lie 代数と呼び，これを $\text{Lie}(\Xi)$ と表記する．これは Ξ を含む最小の Lie 代数である．

Definition 2.4 - 準同型写像と同型写像 (homomorphisms and isomorphisms) -

ある体 \mathcal{F} 上の与えられた 2 つの Lie 代数 \mathcal{L}_1 と \mathcal{L}_2 に対して，準同型写像 (homomorphisms) $\phi: \mathcal{L}_1 \rightarrow \mathcal{L}_2$ は，任意の $\alpha, \beta \in \mathcal{F}$ と $x, y \in \mathcal{L}_1$ に対して

$$\phi(\alpha x + \beta y) = \alpha \phi(x) + \beta \phi(y) \quad (2.14)$$

を満たし、それぞれの交換子関係を保存する。つまり、

$$\phi([x, y]_1) = [\phi(x), \phi(y)]_2 \quad (2.15)$$

となる写像である。ここで $[\cdot, \cdot]_i$ は代数 \mathcal{L}_i で定義される交換子である。

準同型写像 ϕ が全単射の場合、同型写像 (isomorphisms) と呼ぶ。2つの Lie 代数に対して同型写像が存在するときはこの2つの Lie 代数が同型 (isomorphic) であると表現する。またある Lie 代数 \mathcal{L} から $\mathfrak{gl}(n, R(C))$ への準同型写像を \mathcal{L} の表現 ($n \times n$ 次元の (複素) 行列表現) と呼ぶ。

これらの定義を用いて量子ダイナミクスの制御理論を構築する。

2.1.2 量子ダイナミクスの制御理論

第 2.1.1 項を踏まえて、本項では式 (2.1) で与えられる系に対して原理的にどのような量子ゲートが実装可能になるかを明らかにする理論である量子制御理論について解説する。

量子ゲート (量子操作) は非確率的な過程であることからユニタリ行列で表されるが、これらはハミルトニアンダイナミクス式 (2.2) に従って実装される。ハミルトニアン (2.1) は外部から時刻に応じて制御できるハミルトニアンを加えることができるため、時間依存する形になっている。一方で、任意のユニタリ行列 U には

$$U = \exp(-iH_U t) \quad (2.16)$$

を満たす生成子と呼ばれる時間依存しないハミルトニアン H_U が存在する。ここで時間 $t > 0$ であり、 H_U の大きさによって式 (2.16) の等式が成り立つように t の値を選ぶ。従って、与えられた時間依存するハミルトニアン系によってシミュレートできるハミルトニアンの集合が求めれば、そのハミルトニアンによって生成される量子ゲートが制御できることを明らかにすることができる。以下では与えられた時間依存するハミルトニアンからシミュレートできるハミルトニアンを求め、その系の制御可能性を明らかにする。そのためにまず、本論文における系の制御性とは何かについて Definition 2.5 で定義する。またエルミート行列であるハミルトニアン H に対応する歪エルミート行列を $\bar{H} = -iH$ のように横棒をつけて表し、以下では特に断りがない限り \bar{H} をハミルトニアンと呼ぶことにする。従って式 (2.16) は $U = \exp(\bar{H}_U t)$ となる。

Definition 2.5 - 制御性 (Controllability) -

式 (2.1) の形で与えられたハミルトニアンを持つ閉じた系に対して, 各時刻に対する制御パルス $\{u_k(t)\}_{k=1}^K$ を選ぶことができるとする. この制御パルスを操作することによって制御 (またはシミュレート) できる時間依存しないハミルトニアンの集合を $\mathcal{L}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c)$ とする. ここで制御ハミルトニアンの集合を $\mathcal{S}_c = \{\bar{H}_c^{(k)} \mid k \in [K]\}$ としており, ハミルトニアン $\bar{h} \in \mathcal{L}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c)$ が制御できるとは任意の $\varepsilon > 0$ に対して

$$\|U - e^{\bar{h}}\| < \varepsilon \quad (2.17)$$

を満たす U がこの系に対して実行できることを意味する. 特に $\mathcal{L}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c) = \mathfrak{su}(d)$ となる場合は, 系が “完全制御可能である” と表記する. また, $\mathcal{L}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c)$ に属するハミルトニアンによって実装される量子ゲートを制御可能な量子ゲートと呼ぶ.

$\mathcal{L}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c)$ の定義から

$$\mathcal{L}_{\text{trivial}}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c) := \left\{ a\bar{H}_d + \sum_{k=1}^K b_k \bar{H}_c^{(k)} \mid a \geq 0, b_k \in \mathbb{R} \right\} \subset \mathcal{L}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c) \quad (2.18)$$

となることは明らかであり, 以下では $\mathcal{L}_{\text{trivial}}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c)$ から制御性を拡大していく方法を求める.

始めに式 (2.1) の $H(t)$ において外から操作できないドリフトハミルトニアンがゼロ ($H_d = 0$) である系の制御性を求めるための2つ公式 [1, 15, 68, 69] を紹介する.*¹また Definition 2.5 でハミルトニアン (2.1) の系を \bar{H}_d と $\mathcal{S}_c = \{\bar{H}_c^{(k)} \mid k \in [K]\}$ で表現したように, 以後扱う系はハミルトニアンの集合 $(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c)$ を用いて表す.

Lemma 2.1 - Trotter 公式 -

与えられたハミルトニアンの集合 $(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c)$ に対して, 有界なハミルトニアン \bar{H}_1, \bar{H}_2 が $\mathcal{L}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c)$ に属するとき, 任意の $\alpha_1, \alpha_2 \in [0, \infty)$ に対して $\alpha_1 \bar{H}_1 + \alpha_2 \bar{H}_2 \in \mathcal{L}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c)$ となる.

Lemma 2.2 - 交換子公式 -

与えられたハミルトニアンの集合 $(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c)$ に対して, 有界なハミルトニアン $\pm \bar{H}_1, \pm \bar{H}_2$ が $\mathcal{L}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c)$ に属するとき, $\pm[\bar{H}_1, \bar{H}_2] \in \mathcal{L}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c)$ となる.

*¹ 実際は $H_d \propto \mathbf{1}$ の場合でも使える議論であるが, この項は量子系の絶対位相にのみに寄与することから存在を無視する. また, 非自明のハミルトニアンとは一般に $\mathbf{1}$ だけで表現できないものを言う.

この2つの公式からドリフトハミルトニアンがゼロの場合の系の制御性を Lie 代数を用いて明らかにすることができる。

Theorem 2.1 - $\bar{H}_d = 0$ でのシミュレート可能なハミルトニアン -

任意の制御ハミルトニアンの集合 \mathcal{S}_c に対して $\mathcal{L}(0, \mathcal{S}_c) = \mathcal{L}(0, \text{Lie}(\mathcal{S}_c))$ となる。

まず Lemma 2.1, 2.2 を用いて Theorem 2.1 を証明し、その後この2つの Lemma を証明する。

Theorem 2.1 の証明— 式 (2.18) より、任意の $\mathcal{L}_{\text{trivial}}(0, \mathcal{S}_c)$ の元 x について $-x \in \mathcal{L}_{\text{trivial}}(0, \mathcal{S}_c)$ となる。また Lemma 2.2 から任意の $\pm x, \pm y \in \mathcal{L}_{\text{trivial}}(0, \mathcal{S}_c)$ に対して、行列に対する交換子 $[\cdot, \cdot]$ (以下では単にこれを交換子と呼ぶ) を用いて $\pm[x, y] \in \mathcal{L}(0, \mathcal{S}_c)$ が成り立ち、Lemma 2.1 より実数体上の $\mathcal{L}(0, \mathcal{S}_c)$ は交換子の下で Lie 代数の性質を持つことがわかる。従って $\text{Lie}(\mathcal{S}_c) \subseteq \mathcal{L}(0, \mathcal{S}_c)$ となり、 $\mathcal{L}(0, \mathcal{S}_c) = \mathcal{L}(0, \text{Lie}(\mathcal{S}_c))$ が示される。□

次に Lemma 2.1, 2.2 を証明するが、その前に以下の Lemma 2.3 を明らかにする。ここで以下で用いる $O(x)$ は $\|O(x)\| = \mathcal{O}(x)$ (ランダウの記号) となる行列関数を表す。

Lemma 2.3 ノルムが1の任意の歪エルミート行列 \bar{A} に対して、 $\bar{A}_n := \bar{A} + O(f(n))$ を定義する。ここで $|f(n)|$ は単調減少かつ $\lim_{n \rightarrow \infty} f(n) = 0$ であり、 $\lim_{n \rightarrow \infty} \bar{A}_n = \bar{A}$ を満たすとする。このとき任意の $\alpha > 0$ と整数 $n \geq k$ に対して、

$$\left(1 + \frac{\alpha \bar{A}_n}{n}\right)^n = e^{\alpha \bar{A}} + O(\alpha(f(n) + n^{-1})) \quad (2.19)$$

を満たす自然数 k が存在する。

Lemma 2.3 の証明— 自然数 k が $\alpha \|\bar{A}_k\|_{\infty} / k < 1$ を満たすとき、 $|f(n)|$ は単調減少であることより整数 $n \geq k$ に対して

$$\ln \left(1 + \frac{\alpha \bar{A}_n}{n}\right)^n = n \ln \left(1 + \frac{\alpha \bar{A}_n}{n}\right) = \alpha \bar{A} + \alpha(f(n) + O(n^{-1})) \quad (2.20)$$

となる。ここで最後の等式には $x := \|X\|_{\infty} < 1$ を満たす任意の正規行列 X に対して $\ln(1 + X) = X + O(x^2)$ となることを用いた。従って、

$$\left(1 + \frac{\alpha \bar{A}_n}{n}\right)^n = \exp \{ \alpha \bar{A} + \alpha(f(n) + O(n^{-1})) \} = e^{\alpha \bar{A}} + O(\alpha(f(n) + n^{-1})) \quad (2.21)$$

となり示せた. \square

Lemma 2.1 の証明— 任意の $t > 0$ に対して $U_{\bar{H}_1}(t) = e^{\bar{H}_1 t}$ と $U_{\bar{H}_2}(t) = e^{\bar{H}_2 t}$ が実行可能であるとする. \bar{H}_1 と \bar{H}_2 は有界であることから $\|\bar{H}_1\| = \|\bar{H}_2\| = 1$ としても一般性を失わないので, このとき $0 \leq \tau < \beta^{-1}$ ($\beta := \max\{\alpha_1, \alpha_2\}$) に対して, $U_{\alpha_1 \bar{H}_1}(\tau)U_{\alpha_2 \bar{H}_2}(\tau) = 1 + (\alpha_1 \bar{H}_1 + \alpha_2 \bar{H}_2)\tau + O((\beta\tau)^2)$ が成り立つ. 従って,

$$\begin{aligned} V_n(t) &:= (U_{\alpha_1 \bar{H}_1}(t/n)U_{\alpha_2 \bar{H}_2}(t/n))^n = \left(1 + \frac{t}{n} \left(\alpha_1 \bar{H}_1 + \alpha_2 \bar{H}_2 + O\left(\beta^2 \frac{t}{n}\right)\right)\right)^n \\ &= e^{(\alpha_1 \bar{H}_1 + \alpha_2 \bar{H}_2)t} + O\left(\frac{(\beta t)^2}{n}\right) \end{aligned} \quad (2.22)$$

となる. 式 (2.22) の最後の式を得るのに Lemma 2.3 を用いた. $\mathcal{L}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c)$ に属するハミルトニアンは制御性の定義より任意の精度で実装できるので, 任意の $\varepsilon' > 0$ に対して $\|\tilde{U}_{\alpha_j \bar{H}_j}(t, \varepsilon') - U_{\alpha_j \bar{H}_j}(t)\| < \varepsilon'$ を満たすユニタリ $\tilde{U}_{\alpha_j \bar{H}_j}(t, \varepsilon')$ が実行できる. 従って, $\Delta_j(t, \varepsilon') := \tilde{U}_{\alpha_j \bar{H}_j}(t, \varepsilon') - U_{\alpha_j \bar{H}_j}(t)$, $\tilde{V}_n(t, \varepsilon') := (\tilde{U}_{\bar{H}_1}(t/n, \varepsilon')\tilde{U}_{\bar{H}_2}(t/n, \varepsilon'))^n$ とすると,

$$\begin{aligned} &\left\|\tilde{V}_n(t, \varepsilon') - V_n(t)\right\| \\ &= \left\|(\Delta_1(t/n, \varepsilon') + U_{\alpha_1 \bar{H}_1}(t/n))\tilde{U}_{\alpha_2 \bar{H}_2}(t/n, \varepsilon')\tilde{V}_{n-1}(t/n, \varepsilon') - V_n(t)\right\| \\ &\leq \varepsilon' + \left\|U_{\alpha_1 \bar{H}_1}(t/n)\tilde{U}_{\alpha_2 \bar{H}_2}(t/n, \varepsilon')\tilde{V}_{n-1}(t(n-1)/n, \varepsilon') - V_n(t)\right\| \\ &\leq \qquad \qquad \qquad \vdots \\ &\leq 2n\varepsilon' \end{aligned} \quad (2.23)$$

となる. ここでノルムの三角不等式とユニタリ不変性を用いた. 従って, 実際に実行できる量子ゲート $\tilde{V}_n(t, \varepsilon')$ は

$$\begin{aligned} \left\|\tilde{V}_n(t, \varepsilon') - e^{(\alpha_1 \bar{H}_1 + \alpha_2 \bar{H}_2)t}\right\| &= \left\|\tilde{V}_n(t, \varepsilon') - V_n(t) + O\left(\frac{(\beta t)^2}{n}\right)\right\| \\ &\leq 2n\varepsilon' + O\left(\frac{(\beta t)^2}{n}\right) \end{aligned} \quad (2.24)$$

を満たす. 任意の $\varepsilon > 0$ に対して $2n\varepsilon' + O((\beta t)^2/n) < \varepsilon$ となる ε' と自然数 n が存在するので, ε の精度でハミルトニアン $\alpha_1 \bar{H}_1 + \alpha_2 \bar{H}_2$ がシミュレートできる. \square

Lemma 2.2 の証明— Lemma 2.1 の証明と同様に \bar{H}_1 と \bar{H}_2 は有界であることから $\|\bar{H}_1\| = \|\bar{H}_2\| = 1$ とし, 任意の $t > 0$ に対して $U_{\pm\bar{H}_1}(t) = e^{\pm\bar{H}_1 t}$ と $U_{\pm\bar{H}_2}(t) = e^{\pm\bar{H}_2 t}$ が実行できるとする. このとき, $0 \leq \tau < T$ に対して

$$U_{-\bar{H}_1}(\sqrt{\tau})U_{-\bar{H}_2}(\sqrt{\tau})U_{\bar{H}_1}(\sqrt{\tau})U_{\bar{H}_2}(\sqrt{\tau}) = 1 + [\bar{H}_1, \bar{H}_2]\tau + O(\tau^{\frac{3}{2}}) \quad (2.25)$$

となる $T \in (0, 1)$ が存在するので, 十分大きい $n \in \mathbb{N}$ を用いると Lemma 2.3 から

$$\begin{aligned} W_n(t) &:= \left(U_{-\bar{H}_1}(\sqrt{t/n}) U_{-\bar{H}_2}(\sqrt{t/n}) U_{\bar{H}_1}(\sqrt{t/n}) U_{\bar{H}_2}(\sqrt{t/n}) \right)^n \\ &= \left(1 + \frac{t}{n} \left([\bar{H}_1, \bar{H}_2] + O\left((t/n)^{\frac{1}{2}}\right) \right) \right)^n \\ &= e^{[\bar{H}_1, \bar{H}_2]t} + O\left((t^3/n)^{\frac{1}{2}}\right) \end{aligned} \quad (2.26)$$

となる. Lemma 2.2 の仮定より任意の $\varepsilon' > 0$ に対して $\|\tilde{U}_{\pm\bar{H}_i}(t, \varepsilon') - U_{\pm\bar{H}_i}(t)\| < \varepsilon'$ を満たすユニタリ $\tilde{U}_{\pm\bar{H}_i}(t, \varepsilon')$ が実行できる. 従って, Lemma 2.1 の証明と同様に $\tilde{W}_n(t, \varepsilon') := (\tilde{U}_{-\bar{H}_1}(\sqrt{t/n}, \varepsilon') \tilde{U}_{-\bar{H}_2}(\sqrt{t/n}, \varepsilon') \tilde{U}_{\bar{H}_1}(\sqrt{t/n}, \varepsilon') \tilde{U}_{\bar{H}_2}(\sqrt{t/n}, \varepsilon'))^n$ とすると

$$\left\| \tilde{W}_n(t, \varepsilon') - W_n(t) \right\| \leq 4n\varepsilon' \quad (2.27)$$

となるので,

$$\begin{aligned} \left\| \tilde{W}_n(t, \varepsilon') - e^{[\bar{H}_1, \bar{H}_2]t} \right\| &= \left\| \tilde{W}_n(t, \varepsilon') - W_n(t) + O\left((t/n)^{\frac{1}{2}}\right) \right\| \\ &\leq 4n\varepsilon' + \mathcal{O}\left((t^3/n)^{\frac{1}{2}}\right) \end{aligned} \quad (2.28)$$

が得られる. 任意の $\varepsilon > 0$ に対して $4n\varepsilon' + \mathcal{O}((t^3/n)^{1/2}) < \varepsilon$ となる ε' と自然数 n が存在するので, ε の精度でハミルトニアン $[\bar{H}_1, \bar{H}_2]$ がシミュレートできる. \square

次にドリフトハミルトニアン \bar{H}_d が自明な場合ではなく, 無視できない場合の量子系について考える. ドリフトハミルトニアンが存在する系と制御ハミルトニアンのみの系との違いは全ての $\mathcal{L}_{\text{trivial}}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c)$ の元 x に対して $-x$ が $\mathcal{L}_{\text{trivial}}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c)$ に属するとは限らない点であり, そのため Lemma 2.1, 2.2 からは $\mathcal{L}_{\text{trivial}}(\bar{H}_d, \text{Basis}(\text{Lie}(\mathcal{S}_c))) \subseteq \mathcal{L}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c)$ のみか Theorem 2.1 より明らかになる. ここで制御パルスとして Dirac のデルタ関数 $\delta(x)$ を選ぶことができることを用いた. このとき \bar{H}_d の反転 ($-\bar{H}_d$) の実行可能性を示せば, 交換子公式 (Lemma 2.2) が使えるが, ハミルトニアンの反転の実行可能性は量子系の回帰性 [15, 70] から得ることができる.

Lemma 2.4 - 量子回帰の法則 -

与えられた $d(< \infty)$ 次元のハミルトニアン集合 $(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c)$ に対して

$$\bar{H} \in \mathcal{L}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c) \Rightarrow -\bar{H} \in \mathcal{L}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c). \quad (2.29)$$

Lemma 2.4 から、ドリフトハミルトニアン \bar{H}_d に対してもその反転である $-\bar{H}_d$ がシミュレートできることが示されるため、Trotter・交換子公式 (Lemma 2.1, 2.2) がドリフトハミルトニアンに対しても使えるようになり以下の結論を得る。

Corollary 2.1 - 非自明な \bar{H}_d が存在する系でのシミュレート可能なハミルトニアン -
 任意の有限次元のハミルトニアン集合 $(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c)$ に対して $\mathcal{L}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c) = \mathcal{L}(0, \text{Lie}(\{\bar{H}_d\} \cup \mathcal{S}_c))$ となる。

Corollary 2.1 の証明— $\mathcal{L}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c) \subseteq \mathcal{L}(0, \text{Lie}(\{\bar{H}_d\} \cup \mathcal{S}_c))$ は自明。また Trotter・交換子公式 (Lemma 2.1, 2.4) から $\mathcal{L}_{\text{trivial}}(0, \{\bar{H}_d\} \cup \mathcal{S}_c) \subseteq \mathcal{L}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c)$ となることを用いて Theorem 2.1 の証明より $\mathcal{L}(0, \text{Lie}(\{\bar{H}_d\} \cup \mathcal{S}_c)) \subseteq \mathcal{L}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c)$ がわかる。 \square

従って、以下の手順 [15, 71, 72] を用いて与えられたハミルトニアン集合 $(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c)$ を持つ系に対する制御性を求めることができる。今、 $\mathcal{S} := \{\bar{H}_d\} \cup \mathcal{S}_c$ と定義する。

Procedure 2.1 - 機械的に系の制御性を確認する手順 -

1. $\mathcal{S}'_1 = \{[x, y] \mid x, y \in \mathcal{S}\}$ を計算する。その中で \mathcal{S} と線形独立となっている元を残した集合を \mathcal{S}_1 とする。
2. $\mathcal{S}_1 \neq \phi$ のとき、 $\mathcal{S}'_2 := \{[x, y] \mid x \in \mathcal{S}, y \in \mathcal{S}_1\}$ を求め、その中で $\mathcal{S} \cup \mathcal{S}_1$ と線形独立の元の集合を \mathcal{S}_2 とし、 $m = 2$ とする。 $\mathcal{S}_1 = \phi$ のときは終了。
3. 同様にして、 $\mathcal{S}_m \neq \phi$ のときに $\mathcal{S}'_{m+1} := \{[x, y] \mid x \in \mathcal{S}, y \in \mathcal{S}_m\}$ を求め、その中で $\mathcal{S} \cup_{l=1}^m \mathcal{S}_l$ と線形独立な元の集合を \mathcal{S}_{m+1} とし、 $m \rightarrow m+1$ とする。
4. $\mathcal{S}_m = \phi$ となるまで 3. を繰り返し、 $\mathcal{S}_{M+1} = \phi$ となる最小の $M \in \mathbb{N}_0$ とする。

Procedure 2.1 の過程を経ることによって、 $\text{Lie}(\mathcal{S}) = \text{Span}(\{\bar{H}_d\} \cup_{m=0}^M \mathcal{S}_m)$ となることが以下の Lemma 2.5 からわかり、 \mathcal{S} を含む最小の Lie 代数を得ることができることから、この系の制御性が明らかになる。ここで $\mathcal{S}_0 = \mathcal{S}_c$ とし、上記の \mathcal{S}_m は \mathcal{S} に属する元の多重交換子によって得られていることから、この元を \mathcal{S} から成る深さ m の交換子と呼ぶことにする。また \mathcal{S} に属する元は深さ 0 であるとする。

Lemma 2.5 - 交換子と深さ -

与えられたハミルトニアン \mathcal{S} の集合 \mathcal{S} と任意の自然数 $m, n \in \mathbb{N}$ に対して、 \bar{G}_m と \bar{H}_n をそれぞれ \mathcal{S} から成る深さ m と n の交換子とする。このとき、 $[\bar{G}_m, \bar{H}_n]$ が \mathcal{S} から成る深さ $m+n+1$ の交換子の線形和によって表現できる。

Lemma 2.5 の証明— $m=1$ のとき $\bar{G}_1 = [\bar{G}^{(1)}, \bar{G}^{(0)}]$ となる $\bar{G}^{(0)}, \bar{G}^{(1)} \in \mathcal{S}$ が存在する。従って Jacobi 恒等式より、

$$\begin{aligned} [\bar{G}_1, \bar{H}_n] &= [[\bar{G}^{(1)}, \bar{G}^{(0)}], \bar{H}_n] \\ &= [\bar{G}^{(0)}, [\bar{H}_n, \bar{G}^{(1)}]] + [\bar{G}^{(1)}, [\bar{G}^{(0)}, \bar{H}_n]] \\ &= [\bar{G}^{(0)}, \bar{H}_{n+1}] + [\bar{G}^{(1)}, [\bar{G}^{(0)}, \bar{H}_n]] \end{aligned}$$

となる。ここで $\bar{H}_{n+1} := -[\bar{G}^{(1)}, \bar{H}_n]$ としており、定義から深さ $n+1$ の交換子である。最後の式の右辺第1項は深さ $n+1$ の交換子と \mathcal{S} の元の交換子であり、第2項は深さ n の交換子と \mathcal{S} の2重交換子であることから、どちらの項も深さ $n+2$ の交換子であり、 $m=1$ のときは正しい。

$m=k>1$ のときも同様に、 \bar{G}_k を $\bar{G} \in \mathcal{S}$ と深さ $k-1$ の交換子 \bar{G}_{k-1} によって $\bar{G}_k = [\bar{G}, \bar{G}_{k-1}]$ のように分解し、Jacobi 恒等式を用いると

$$\begin{aligned} [\bar{G}_k, \bar{H}_n] &= [[\bar{G}, \bar{G}_{k-1}], \bar{H}_n] \\ &= [\bar{G}_{k-1}, [\bar{H}_n, \bar{G}]] + [\bar{G}, [\bar{G}_{k-1}, \bar{H}_n]] \\ &= [\bar{G}_{k-1}, \bar{H}'_{n+1}] + [\bar{G}, [\bar{G}_{k-1}, \bar{H}_n]] \end{aligned} \tag{2.30}$$

のようになる。 $m < k$ で Lemma 2.5 が正しいと仮定すると、第1項の $[\bar{G}_{k-1}, \bar{H}'_{n+1}]$ は深さ $m+k+1$ の線形和に分解でき、第2項にある $[\bar{G}_{k-1}, \bar{H}_n]$ は深さ $n+k$ の交換子の線形和で表現できる。 $\bar{G} \in \mathcal{S}$ であることから、第2項もまた深さ $n+k+1$ の交換子に分解できることになり、 $m=k$ でも Lemma 2.5 を満たすことがわかる。 $m=1$ でも成り立つことから帰納的に示すことができた。□

Lemma 2.5 より、与えられたハミルトニアン \mathcal{S} の集合 \mathcal{S} から成る2つの任意の深さの交換子に対する交換子も Trotter・交換子公式 (Lemma 2.1, 2.2) から Procedure 2.1 で得られたハミルトニアンによってシミュレート可能であることがわかる。従って Procedure 2.1 によって制御可能なハミルトニアン \mathcal{S} の基底を得ることができることが確認される。

この Procedure 2.1 を用いて以下の系の制御性を求める。

Example 2.2 - 2量子ビットで完全制御可能な系 -

2量子ビットから成るドリフトハミルトニアンが自明 ($\bar{H}_d = 0$) であり, 制御ハミルトニアンが $\mathcal{S}_c = \{\bar{\sigma}_1^{(1)}, \bar{\sigma}_3^{(1)}, \bar{h}_1, \bar{h}_2\}$ であるとする. ここで,

$$\begin{aligned}\bar{h}_1 &:= i(\bar{\sigma}_3^{(1)} \otimes \bar{\sigma}_2^{(2)} - \bar{\sigma}_2^{(1)} \otimes \bar{\sigma}_3^{(2)}), \\ \bar{h}_2 &:= i(\bar{\sigma}_2^{(1)} \otimes \bar{\sigma}_1^{(2)} - \bar{\sigma}_1^{(1)} \otimes \bar{\sigma}_2^{(2)})\end{aligned}\tag{2.31}$$

とし, $\bar{\sigma}_i^{(1)}$ は1番目の量子ビットに対する Pauli 行列 $\bar{\sigma}_i$ ($i = 1, 2, 3$) であり, $A^{(1)} = A^{(1)} \otimes \mathbf{1}^{(2)}$ のように他の量子ビットに対して作用する恒等行列 $\mathbf{1}$ は省略した.

Example 2.2 の制御性— Example 2.2 で与えられた系に対して Procedure 2.1 に従って制御可能なハミルトニアンの集合を求める. 線型独立となる結果のみを挙げると, \mathcal{S}_1 は

$$\begin{aligned}\bar{H}_1 &:= [\bar{\sigma}_3^{(1)}, \bar{\sigma}_1^{(1)}] = \bar{\sigma}_2^{(1)}, \\ \bar{H}_2 &:= [\bar{h}_1, \bar{\sigma}_1^{(1)}] = i(\bar{\sigma}_2^{(1)} \otimes \bar{\sigma}_2^{(2)} + \bar{\sigma}_3^{(1)} \otimes \bar{\sigma}_3^{(2)}), \\ \bar{H}_3 &:= [\bar{h}_2, \bar{\sigma}_1^{(1)}] = -i\bar{\sigma}_3^{(1)} \otimes \bar{\sigma}_1^{(2)}, \\ \bar{H}_4 &:= [\bar{h}_1, \bar{\sigma}_3^{(1)}] = -i\bar{\sigma}_1^{(1)} \otimes \bar{\sigma}_3^{(2)}, \\ \bar{H}_5 &:= [\bar{h}_2, \bar{\sigma}_3^{(1)}] = i(\bar{\sigma}_1^{(1)} \otimes \bar{\sigma}_1^{(2)} + \bar{\sigma}_2^{(1)} \otimes \bar{\sigma}_2^{(2)}), \\ \bar{H}_6 &:= 4[\bar{h}_2, \bar{h}_1] = \bar{\sigma}_2^{(1)} + \bar{\sigma}_2^{(2)}\end{aligned}\tag{2.32}$$

となり, \mathcal{S}_2 と \mathcal{S}_3 はそれぞれ

$$\begin{aligned}\bar{H}_7 &:= [\bar{h}_1, \bar{H}_1] = -i\bar{\sigma}_1^{(1)} \otimes \bar{\sigma}_2^{(2)} \in \mathcal{S}_2, \\ \bar{H}_8 &:= [\bar{h}_2, \bar{H}_1] = -i\bar{\sigma}_3^{(1)} \otimes \bar{\sigma}_2^{(2)} \in \mathcal{S}_2, \\ \bar{H}_9 &:= 2[\bar{h}_1, \bar{H}_2] = \bar{\sigma}_1^{(2)} - \bar{\sigma}_1^{(1)} \in \mathcal{S}_2,\end{aligned}\tag{2.33}$$

$$\begin{aligned}\bar{H}_{10} &:= 4[\bar{h}_2, \bar{H}_2] = \bar{\sigma}_3^{(2)} - \bar{\sigma}_3^{(1)} \in \mathcal{S}_2, \\ \bar{H}_{11} &:= [\bar{H}_7, \bar{\sigma}_3^{(1)}] = i\bar{\sigma}_2^{(1)} \otimes \bar{\sigma}_2^{(2)} \in \mathcal{S}_3\end{aligned}\tag{2.34}$$

となる. $\mathfrak{su}(4)$ の次元は 15 なので以上のハミルトニアンで 2量子ビット系に対しては十分であり, 任意の 2量子ビットユニタリを実装できる完全制御可能な系であることが確認できる.

以上の結果より, 以下の系の制御性も得ることができる.

Example 2.3 - 1次元 Heisenberg 模型 -

n 量子ビットから成り，ドリフトハミルトニアン \bar{H}_d が 1 次元の Heisenberg 模型，つまり任意の $|J| > 0$, $h \in \mathbb{R}$ に対して

$$\bar{H}_d = J \sum_{k=1}^{n-1} i(\bar{\sigma}_1^{(k)} \otimes \bar{\sigma}_1^{(k+1)} + \bar{\sigma}_2^{(k)} \otimes \bar{\sigma}_2^{(k+1)} + \bar{\sigma}_3^{(k)} \otimes \bar{\sigma}_3^{(k+1)}) + h \sum_{k=1}^n \bar{\sigma}_3^{(k)} \quad (2.35)$$

であり，片端の量子ビットに作用できる制御ハミルトニアン $\mathcal{S}_c = \{\bar{\sigma}_1^{(1)}, \bar{\sigma}_3^{(1)}\}$ 持つ系。

Example 2.3 の制御性— Trotter 公式 (Lemma 2.1) により \bar{H}_d の $h\bar{\sigma}_3^{(1)}$ の項を消去でき，量子回帰の法則 (Lemma 2.4) などから $\mathcal{S} := \{\pm \frac{1}{J}(\bar{H}_d - h\bar{\sigma}_3^{(1)}), \pm \bar{\sigma}_1^{(1)}, \pm \bar{\sigma}_3^{(1)}\}$ が制御可能であるので， \mathcal{S} に対して深さ 1 の交換子の集合である \mathcal{S}_1 に属する

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_2^{(1)} &= [\bar{\sigma}_3^{(1)}, \bar{\sigma}_1^{(1)}], \\ \bar{H}_1 &:= \frac{1}{J}[\bar{\sigma}_1^{(1)}, \bar{H}_d - h\bar{\sigma}_3^{(1)}] = i(\bar{\sigma}_3^{(1)} \otimes \bar{\sigma}_2^{(2)} - \bar{\sigma}_2^{(1)} \otimes \bar{\sigma}_3^{(2)}), \\ \bar{H}_2 &:= \frac{1}{J}[\bar{\sigma}_3^{(1)}, \bar{H}_d - h\bar{\sigma}_3^{(1)}] = i(\bar{\sigma}_2^{(1)} \otimes \bar{\sigma}_1^{(2)} - \bar{\sigma}_1^{(1)} \otimes \bar{\sigma}_2^{(2)}), \end{aligned} \quad (2.36)$$

も制御できる．これらは最初の 2 量子ビットにのみかかるハミルトニアンであり， $\bar{\sigma}_1^{(1)}, \bar{\sigma}_3^{(1)}, \bar{H}_1, \bar{H}_2$ は Example 2.2 の系と同じハミルトニアンであることから量子ビット 1, 2 に関して完全制御可能であることがわかる．従って，量子ビット 1, 2 に対する Heisenberg 相互作用をキャンセルした

$$\bar{H}_d = J \sum_{k=2}^{n-1} i(\bar{\sigma}_1^{(k)} \otimes \bar{\sigma}_1^{(k+1)} + \bar{\sigma}_2^{(k)} \otimes \bar{\sigma}_2^{(k+1)} + \bar{\sigma}_3^{(k)} \otimes \bar{\sigma}_3^{(k+1)}) + h \sum_{k=2}^n \bar{\sigma}_3^{(k)} \quad (2.37)$$

も制御可能となる．また量子ビット 2 に対する $\bar{\sigma}_1^{(2)}, \bar{\sigma}_3^{(2)}$ も制御可能となるので，量子ビット 1 を除いた $n-1$ 量子ビットの Heisenberg 模型の系となっている．従って全く同様の議論で量子ビット 2, 3 に関して完全制御可能であることがわかる．この手順を繰り返すことにより，全ての $k \in [n-1]$ に対する量子ビット $k, k+1$ に対して完全制御可能であることがわかる．従って，これらの制御性を合わせることで全系に対しても完全制御可能であることがわかる (付録 A.1 参照)．

以上の系のようにハミルトニアンの形が与えられていれば，Lie 代数的なアプローチを用いることによって，系の制御性を明らかにすることができる．しかしこの方法では操作にかかる制御時間や実際の制御方法について示すことはできない．実際に交換子公式

や量子回帰の法則を用いた操作方法で求める量子ゲートを実行しようとする、第 3.1.4 項で議論するように操作にかかる時間が非常に大きくなることが知られており [45–47], 実装を目指したアプローチとしては効率的ではない。しかし, 与えられた系において原理的にどのような制御が可能であるかを明らかにするには非常に便利な関係であるため, 以降の議論では Lie 代数的な方法を用いて系の制御性を求める。

2.2 量子系のロバスト制御

第 2.1 節では量子系のハミルトニアン $(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c)$ が与えられた場合の制御可能性を明らかにするための準備とその方法について紹介した。本節では本論文のテーマである量子ダイナミクスのロバスト制御の概念やそれに関する先行研究について述べる。

前節までは与えられた量子系のハミルトニアンの行列表現が全て既知である場合を扱った。しかし, 実際には外部磁場などの影響によってハミルトニアンを正確に知ることには限界 [30–35] がある場合や複数の系に対して同じ制御パルスを用いて同時に制御を実行したい場合 [28] などがある。この場合, 系のハミルトニアンの係数の値が正確に分かっているわけではなく, ある範囲にいたことが保証される状況で制御を実行することが要求される。本論文ではハミルトニアンに不定定数が含まれる場合を取り扱い, この不定定数に依存せず目的の量子ゲートの実装をすること, またはハミルトニアンダイナミクスのシミュレートをすることを, その不定定数に対するロバスト制御と呼ぶことにする。問題を明確にするために, 始めに以下のような量子系を考える。

Example 2.4 - 1 量子ビットの量子系に 1 つの不定定数を含んだ量子系 -
1 量子ビットの量子系に不定定数 $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ を含んだハミルトニアン

$$\bar{H}(t) = \omega(u_1(t)\bar{\sigma}_1 + u_2(t)\bar{\sigma}_3). \quad (2.38)$$

つまり, $\bar{H}_d = 0$, $\mathcal{S}_c = \{\omega\bar{\sigma}_1, \omega\bar{\sigma}_3\}$ である。

Example 2.4 では不定定数 ω が $[\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ の範囲にあること, また制御ハミルトニアンについては $\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_3$ のように行列の形はわかっているがその係数が不明な場合を考える。また本論文では基本的には不定定数は 1 つである場合を取り扱うが, 複数の不定定数に対する制御への拡張についても議論する。Example 2.4 の系の制御性については第 2.2.3 項で取り扱う。

Example 2.4 では不定定数が $[\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ 内の連続値を取りうる場合を考えているが, 例えば $\omega \in \Omega_{N+1} = \left\{ \frac{(N-n)\omega_* + n\omega^*}{N} \mid n = 0, 1, \dots, N \right\}$ のように ω の取りうる値が有限

である場合も考えることができる。実際にこのようなアプローチはアンサンブル制御（第2.2.1項）や第2.3節で説明するようにロバスト制御を実行するための制御パルスを数値解析によって探索する場合に非常に有益となる。

具体的なロバスト制御の解析に入る前に、本論文におけるロバスト制御の定義を定めておく。

Definition 2.6 - ロバスト制御 -

d 次元の量子系について、ハミルトニアン $\bar{H} \in \mathfrak{su}(d)$ が $\Omega \subset \mathbb{R}$ に対してロバスト制御可能であるとは、任意の $\varepsilon > 0$, $T > 0$, $\omega \in \Omega$ に対して

$$\left\| \mathcal{T} e^{\int_0^T \bar{H}_\omega(t) dt} - e^{\bar{H}T} \right\| < \varepsilon \quad (2.39)$$

となる制御パルス $\{u_k(t)\}_{k=1}^K$ が存在することを意味する。ここで $\bar{H}_\omega(t)$ は不定定数が ω であった場合のハミルトニアンである。このとき、制御パルス $\{u_k(t)\}_{k=1}^K$ をロバスト制御パルスと呼び、また任意の $\mathfrak{su}(d)$ の元が Ω に対してロバスト制御可能な系を“ Ω に対して完全ロバスト制御可能な系”と呼ぶ。

本章では離散量である不定定数を含む場合（第2.2.1項）と1量子ビットの系に連続量である不定定数を含む場合（第2.2.3項）のロバスト制御について解説し、本論文の主題である更に大きな系の連続量不定定数に対するロバスト制御の可能性を解析するための準備を行う。

2.2.1 アンサンブル制御

ここでは、不定定数 ω が有限の集合 $\Omega_{N+1} := \left\{ \frac{(N-n)\omega^{(i)} + n\omega^{(f)}}{N} \mid n = 0, 1, \dots, N \right\} \subset [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ である場合のロバスト制御について解説する [27, 55–58]。最初に例として以下の系を考える。

Example 2.5 - ドリフトハミルトニアンに離散不定定数を持つ量子系 -

整数 $N \geq 2$ に対して、不定定数 ω が Ω_N のいずれかに属しているとする。このとき、 d 次元の K 個の制御ハミルトニアン $\mathcal{S}_c = \{\bar{H}_c^{(1)}, \bar{H}_c^{(2)}, \dots, \bar{H}_c^{(K)}\} \subset \mathfrak{su}(d)$ を持つ量子系

$$\bar{H}(t) = \bar{H}_d(\omega) + \sum_{k=1}^K u_k(t) \bar{H}_c^{(k)} \quad (2.40)$$

を定義する。ここで、任意の $\omega \in \Omega_N$ に対して $\bar{H}_d(\omega) \in \mathfrak{su}(d)$ である。

ここでの目標はすべての $\omega \in \Omega_N$ に対して、同時に目的の量子ゲートまたはハミルトニアンダイナミクスの実装することである。そのために以下の擬似的なハミルトニアン系 $\bar{\mathbb{H}}(t) \in \mathfrak{su}(d \times N)$ を考える。

$$\begin{aligned} \bar{\mathbb{H}}_d(\Omega_N) &:= \bigoplus_{n=1}^N \bar{H}_d(\omega_n) \\ &= \begin{bmatrix} \bar{H}_d(\omega_1) & & & \\ & \bar{H}_d(\omega_2) & & \\ & & \ddots & \\ & & & \bar{H}_d(\omega_N) \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (2.41a)$$

$$\bar{\mathbb{H}}_c^{(k)} := \bigoplus_{n=1}^N \bar{H}_c^{(k)} \quad (k \in [K]), \quad (2.41b)$$

$$\bar{\mathbb{H}}(t) := \bar{\mathbb{H}}_d(\Omega_N) + \sum_{k=1}^K u_k(t) \bar{\mathbb{H}}_c^{(k)}. \quad (2.41c)$$

ここで $\omega_n := \frac{(N-n)\omega^{(i)} + (n-1)\omega^{(f)}}{N-1} \in \Omega_N$ とした。定義からわかるように $\bar{\mathbb{H}}(t)$ は Ω_N が取りうる全ての ω_n に関するハミルトニアンをブロック対角化した行列である。この系は有限であるため、Trotter・交換子公式や量子回帰の法則 (Lemma 2.1, 2.2, 2.4) を用いることができ、Procedure 2.1 に従って制御性を求めることができる。また $\bar{\mathbb{H}}(t)$ 系はブロック対角化された形であることから、完全制御可能 (全ての $(\mathfrak{su}(d \times N))$ が制御可能) とはならず、最大で $(d^2 - 1) \times N$ の独立なハミルトニアンを作る。この最大値となる系では各 ω_n ($n \in [N]$) を持つ系に対してそれぞれ $\mathfrak{su}(d)$ 上の任意のハミルトニアンが同時に制御可能となることを意味する。これはアンサンブル制御 (ensemble control) と呼ばれ、系のハミルトニアンがいくつかの候補のうちどれであるか明らかではない際にどのハミルトニアン系であるかを識別する方法として提案された [55]。本論文の主題となるロバスト制御はアンサンブル制御の一種であり、全系 $\omega \in \Omega_N$ に対して同じ制御の実装を目的としているため、アンサンブル制御が可能である場合はロバスト制御も可能となる。アンサンブル制御可能性については以下の定理 [55, 57] が知られている。(証明は付録 A.2 で行う。)

Theorem 2.2 - アンサンブル制御 -

K 個の制御ハミルトニアンを持った N 個のハミルトニアン

$$\bar{H}_n(t) = \bar{H}_{d,n} + \sum_{k=1}^K u_k(t) \bar{H}_{c,n}^{(k)} \quad (n \in [N]) \quad (2.42)$$

のダイナミクスを考える。 $\bar{\mathbb{H}}_d := \bigoplus_{n=1}^N \bar{H}_{d,n}$ と任意の $k \in [K]$ に対して $\bar{\mathbb{H}}_c^{(k)} := \bigoplus_{n=1}^N \bar{H}_{c,n}^{(k)}$ とすると、 $\bar{\mathbb{H}}(t) = \bar{\mathbb{H}}_d + \sum_{k=1}^K u_k(t) \bar{\mathbb{H}}_c^{(k)}$ の系が以下の (1), (2) の条件を満

たすときアンサンブル制御可能となる.

全ての $n \in [N]$ に対して,

- (1) $\mathcal{L}_n := \text{Lie}(\{\bar{H}_{d,n}, \bar{H}_{c,n}^{(1)}, \dots, \bar{H}_{c,n}^{(K)}\})$ が単純代数である.
- (2) n を除いた全ての $n' \in [N]$ と全ての $k \in [K]$ に対して,

$$\phi_{nn'}(\bar{H}_{d,n}) = \bar{H}_{d,n'}, \quad \phi_{nn'}(\bar{H}_{c,n}^{(k)}) = \bar{H}_{c,n'}^{(k)} \quad (2.43)$$

を満たす同型写像 $\phi_{nn'} : \mathcal{L}_n \rightarrow \mathcal{L}_{n'}$ が存在しない.

特に (1) を満たすとき, (2) の条件はアンサンブル制御が可能となるための必要十分条件となる.

Theorem 2.2 の (1) はアンサンブル制御を実行する際に $\bigoplus_{n=1}^N \mathfrak{su}(d_n)$ の全ての元が制御可能となるための条件となる. ここで d_n は $\bar{H}_n(t)$ の次元である. \mathcal{L}_n が単純代数でないときは, 不変部分空間が存在してしまうため, この部分空間から抜けられない制御が存在する事がありうるために必要になる. よって, (1) の条件は完全アンサンブル制御に必要な条件であり, (1) を満たさない場合でも目的の制御によってはアンサンブル制御が可能であることがある. この場合に関しては第 3.1.3 項で取り扱う. 一方 (2) の条件は, $\omega \in \Omega_N$ それぞれの系が独立に制御可能かどうかに関わるものとなっている. Example 2.5 は特に $K = 1$ ですべての $n \in [N]$ に対して $\bar{H}_{d,n} = \bar{H}_d(\omega_n)$, $\bar{H}_{c,n}^{(1)} = \bar{H}_c$ の場合となっている.

Theorem 2.2 (Example 2.5) ではドリフトハミルトニアンに不定定数 ω が含まれることを仮定しているが, 不定定数が制御ハミルトニアンに含まれている場合でも同様の方法でロバスト制御性を明らかにすることができる. また L 個の不定定数 ω_l ($l \in [L]$) をそれぞれ N_l に離散化した場合でも, 同様の手続きで $\prod_{l=1}^L N_l$ 個の系をブロック対角化することによって Theorem 2.2 を適用でき, ロバスト制御の可能性を得ることができる.

実際の物理系に対してロバスト制御を実行したいような状況では, 上記のような不定定数が離散化された有限の候補になっているとは考えにくい. しかし, 連続不定定数 $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ を $\Omega_N \subset [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ のように離散化し仮想ハミルトニアン $\bar{\mathfrak{H}}(t)$ を考えることによって, 目的の量子ゲートを実行するための制御パルス $u_k(t)$ を数値的に探索する量子最適化アルゴリズム (第 3.2 節) を使うことができる. つまり, ロバスト制御によって実装したい量子ゲートを $U \in SU(d)$ とすると, 離散化した仮想量子系 $\bar{\mathfrak{H}}(t)$ に対

して実装したい量子ゲートを $U := \bigoplus_{n=1}^N U$ とすることでロバスト制御パルスを最適化アルゴリズムによって求めることができる。またその得られた制御パルスによってより一般的な $\omega \in \bar{\Omega}_N := [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}] \setminus \Omega_N$ の条件下での制御性がどのようなようになるかを調査することが可能である。そこで第 2.2.2 項では、離散化した不定定数 $\omega \in \Omega_N$ に対するロバスト制御が可能となる制御パルスが見つかった場合について、同じ制御パルスを用いて $\omega \in \bar{\Omega}_N$ の点でのハミルトニアンダイナミクスによって実装される量子ゲートと目的の量子ゲート U とのエラーの上界を解析的に求める。また、第 2.3 節では本研究でも利用する制御パルスを見つける最適化アルゴリズムを紹介し、第 3 章でこれらを用いて 2 量子ビット系の連続不定定数に対するロバスト制御可能性を解析する。

2.2.2 ハミルトニアンの違いによるエラーの上界

第 2.2.1 項では離散化した不定定数に対するロバスト制御について解説した。ここでは離散化した不定定数 $\omega \in \Omega_N$ に対するロバスト制御パルスが存在する場合に、離散化した点間 $\bar{\Omega}_N$ のダイナミクスがどのようなようになるかを解析する。まず、そのために以下の定理 [53, 54] を証明する。

Theorem 2.3 - 異なるハミルトニアンが生成する量子ゲートの差の上界 -

全ての $t \in \mathbb{R}$ に対して $\bar{H}_1(t), \bar{H}_2(t) \in \mathfrak{su}(d)$ となる時間依存ハミルトニアンを考える。ここで d は系の次元である。このとき、任意の $T > 0$ に対して

$$\left\| \mathcal{T}e^{\int_0^T \bar{H}_1(t)dt} - \mathcal{T}e^{\int_0^T \bar{H}_2(t)dt} \right\| \leq \int_0^T dt \|\bar{H}_1(t) - \bar{H}_2(t)\| \quad (2.44)$$

となる。

Theorem 2.3 の証明— ハミルトニアン $\bar{H}_j(t)$ によって生成される量子ゲート $U_j(t)$ の時間発展は Schrödinger 方程式

$$\frac{d}{dt} U_j(t) = \bar{H}_j(t) U_j(t) \quad (2.45)$$

によって記述される。 $\bar{H}_j^\dagger(t) = -\bar{H}_j(t)$ であることから、式 (2.45) のエルミート共役は $dU_j^\dagger(t)/dt = U_j^\dagger(t)(-\bar{H}_j(t))$ となる。従って

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(U_1^\dagger(t) U_2(t) \right) &= U_1^\dagger(t) (-\bar{H}_1(t)) U_2(t) + U_1^\dagger \bar{H}_2 U_2(t) \\ &= U_1^\dagger(t) (-\bar{H}_1(t) + \bar{H}_2(t)) U_2(t) \end{aligned} \quad (2.46)$$

となる. 今 $U_j(0) = \mathbf{1}$ とし, 式 (2.46) の両辺を t に対して 0 から T まで積分すると,

$$U_1^\dagger(T)U_2(T) - \mathbf{1} = \int_0^T dt \left(U_1^\dagger(t) (-\bar{H}_1(t) + \bar{H}_2(t)) U_2(t) \right) \quad (2.47)$$

となる. よって

$$\begin{aligned} \left\| U_1^\dagger(T)U_2(T) - \mathbf{1} \right\| &= \left\| \int_0^T dt \left(U_1^\dagger(t) (-\bar{H}_1(t) + \bar{H}_2(t)) U_2(t) \right) \right\| \\ &\leq \int_0^T dt \|\bar{H}_1(t) - \bar{H}_2(t)\| \end{aligned} \quad (2.48)$$

が得られる. ここで第2式を得るのに三角不等式とノルムのユニタリ不変性 (1.6) を用いた. さらにユニタリ不変性と $U_j(T) = \mathcal{T}e^{\int_0^T \bar{H}_j(t)dt}$ であることから, 式 (2.48) の左辺のノルムの中の項に左から $U_1(T)$ を掛けることで式 (2.44) が得られる. \square

Theorem 2.3 を用いると, Example 2.5 の系に対してターゲット量子ゲート $\mathbb{U} = \bigoplus_{k=1}^K U$ ($U \in \text{SU}(d)$) がエラーなしで実行できる制御パルス $\{u_k(t)\}_{k=1}^K$ が存在した際に, $\omega \in \bar{\Omega}_N$ におけるダイナミクスと U との差異の上界が得られる. つまり, 任意の $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$, $T > 0$ に対して

$$U_\omega(T) := \mathcal{T} \exp \left[\int_0^T dt \left(\bar{H}_d(\omega) + \sum_{k=1}^K u_k(t) \bar{H}_c^{(k)} \right) \right] \quad (2.49)$$

と定義すると, 全ての $\omega \in \Omega_N$ に対して $U_\omega(T) = U$ となる T が存在する. よって Theorem 2.3 より, 任意の $\omega' \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に対して

$$\|U_\omega(T) - U_{\omega'}(T)\| \leq T \|H_d(\omega) - H_d(\omega')\| \quad (2.50)$$

が成り立つ. いま, $\bar{H}_d(\omega)$ は線型写像 $\omega \mapsto A + \omega B$ ($A, B \in \mathfrak{su}(d)$) であると仮定すると, $\|H_d(\omega) - H_d(\omega')\| = |\omega - \omega'| \cdot \|B\|$ となる. また, $U_{\omega \in \Omega_N}(T) = U$ であり, 任意の $\omega' \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に対して $|\omega - \omega'| \leq (\omega^{(f)} - \omega^{(i)})/2(N-1)$ となる $\omega \in \Omega_N$ が存在することから,

$$\|U - U_{\omega'}(T)\| \leq \min_{\omega \in \Omega_N} T \|(\omega - \omega')B\| \leq \frac{(\omega^{(f)} - \omega^{(i)})T}{2(N-1)} \|B\| \quad (2.51)$$

が得られる. ここで, ダイナミクスの実行時間 T は分割数 N が増えるに従って短くなることはなく, 長くなることが予想されることから N 依存性 ($T(N)$) を持つ. 式 (2.51)

から $T(N) < \mathcal{O}(N)$ の依存性がある場合、 $N \rightarrow \infty$ で右辺がゼロに収束する。そのため与えられた分割数 N に対して量子ゲート U が実行可能となる最小時間 $T(N)$ を求めることは、連続不定定数 $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に対するロバスト制御可能性を明らかにするための重要な解析となる。

さらに $\omega \in \Omega_N$ に対して $U_\omega(T) = U$ ではなく、 $\varepsilon > 0$ に対して $\|U - U_\omega(T)\| < \varepsilon$ となる制御パルスが存在する場合には、任意の $\omega' \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に対して

$$\begin{aligned} \|U - U_{\omega'}\| &= \|U - U_\omega(T) + U_\omega(T) - U_{\omega'}\| \\ &\leq \|U - U_\omega(T)\| + \|U_\omega(T) - U_{\omega'}\| \\ &< \varepsilon + \min_{\omega \in \Omega_N} T \|(\omega - \omega')B\| \leq \varepsilon + \frac{(\omega^{(f)} - \omega^{(i)})T}{2(N-1)} \|B\| \end{aligned} \quad (2.52)$$

となる。ここで第2式には三角不等式を用い、最後の式では式(2.51)を用いた。

2.2.3 1量子ビット系への連続不定定数に対するロバスト制御

ここまでは離散不定定数に対するロバスト制御(第2.2.1項)、あるいはそのアプローチを用いた連続不定定数に対するロバスト制御(第2.2.2項)についての考察を行った。しかし、第2.2.2項の方法では制御に必要な最小時間 $T(N)$ が解析的に求められていないため、連続不定定数に対するロバスト制御が可能であるかは明らかではない。ここでは[59,60]に従って原理的に連続不定定数に対するロバスト制御が可能となる1量子ビット系の提示とその証明を紹介する。この方法は次章以降で2量子ビットやさらに一般的な系に拡張する際に重要な手がかりとなる。

Example 2.6 - 制御ハミルトニアンの強さが不定定数の場合 (Example 2.4) -

不定定数 $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ を含んだハミルトニアン

$$\bar{H}(t) = \omega(u_1(t)\bar{\sigma}_1 + u_2(t)\bar{\sigma}_3). \quad (2.53)$$

を持つ量子系。ここで $\omega^{(i)}$ と $\omega^{(f)}$ は $-\infty < \omega^{(i)} < \omega^{(f)} < \infty$ を満たし、既知の値であるとする。

始めに Example 2.6 の系を扱い、この系のロバスト制御可能性について証明する。Definition 2.5に従うと、 $\mathcal{S}_c = \{\omega\bar{\sigma}_1, \omega\bar{\sigma}_3\}$ であり、 \mathcal{S}_c は有界なので Trotter 公式と交換子公式が使える。まず、交換子公式から $\omega^2\bar{\sigma}_2 = [\omega\bar{\sigma}_3, \omega\bar{\sigma}_1] \in \mathcal{L}(0, \mathcal{S}_c)$ となる。また、任

意の $m \in \mathbb{N}$ において $\omega\bar{\sigma}_1, \omega\bar{\sigma}_3$ に対して $\omega^2\bar{\sigma}_2$ の深さ $2m$ の交換子は

$$\begin{aligned}\pm(-1)^m \omega^{4m+1} \bar{\sigma}_1 &= \underbrace{\text{ad}_{\omega^2\bar{\sigma}_2} \circ \cdots \circ \text{ad}_{\omega^2\bar{\sigma}_2}}_{2m}(\pm\omega\bar{\sigma}_1), \\ \pm(-1)^m \omega^{4m+1} \bar{\sigma}_3 &= \underbrace{\text{ad}_{\omega^2\bar{\sigma}_2} \circ \cdots \circ \text{ad}_{\omega^2\bar{\sigma}_2}}_{2m}(\pm\omega\bar{\sigma}_3)\end{aligned}\tag{2.54}$$

となり, $\omega^2\bar{\sigma}_2$ の深さ $2m-1$ の交換子は

$$\begin{aligned}\pm(-1)^m \omega^{4m-1} \bar{\sigma}_3 &= \underbrace{\text{ad}_{\omega^2\bar{\sigma}_2} \circ \cdots \circ \text{ad}_{\omega^2\bar{\sigma}_2}}_{2m-1}(\pm\omega\bar{\sigma}_1), \\ \mp(-1)^m \omega^{4m-1} \bar{\sigma}_1 &= \underbrace{\text{ad}_{\omega^2\bar{\sigma}_2} \circ \cdots \circ \text{ad}_{\omega^2\bar{\sigma}_2}}_{2m-1}(\pm\omega\bar{\sigma}_3)\end{aligned}\tag{2.55}$$

となる. ここで $\text{ad}_X(Y) := [X, Y]$ と定義し, \circ は写像の合成, つまり $\text{ad}_X \circ \text{ad}_Y(Z) = [X, [Y, Z]]$ を意味する. 以上の結果から, $i = 1, 3$ に対して $\omega^{2m-1}\bar{\sigma}_i \in \mathcal{L}(0, \mathcal{S}_c)$ であることがわかる. また Trotter 公式から, これらの線型和のハミルトニアンも制御可能である. 従って $x \in \mathbb{R}$ に関する任意の多項式関数 $f(x)$ に対して, $\omega f(\omega^2)\bar{\sigma}_i$ も制御可能となる. 今 $F(x) := xf(x^2)$ とすると, $F(x)$ は奇関数であることから, $[\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ がゼロを含まないとき, つまり $\omega^{(i)}\omega^{(f)} > 0$ のときには, $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ の範囲で $F(\omega)$ が任意の精度で一定となる関数 $f(\omega)$ が存在する. (詳しくは第 3.1.4 項) 従って, Definition 2.5 から $\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_3 \in \mathcal{L}(0, \mathcal{S}_c)$ となることがわかる. また $\bar{\sigma}_2 = [\bar{\sigma}_3, \bar{\sigma}_1] \in \mathcal{L}(0, \mathcal{S}_c)$ より, Example 2.6 の系は $\omega^{(i)}\omega^{(f)} > 0$ を満たすとき, $[\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に対して完全ロバスト制御可能である.

以上のように不定定数 ω に対して交換子公式を使うことで有限次の ω の冪を持ったハミルトニアンが制御できるようになり, Trotter 公式から ω に関する多項式を用いて目的の関数 (ロバスト制御の場合は定数) に近似することができる. 本研究ではこのようにしてハミルトニアンが定数となるように近似することを多項式近似 (polynomial approximation) と呼ぶ. 以下では, 多項式近似を用いて連続不定定数に対するロバスト制御の可能性を導く.

Example 2.6 は制御ハミルトニアンに不定定数が含まれている系であるが, 次にドリフトハミルトニアンに不定定数が含まれている場合を考える.

Example 2.7 - ドリフトハミルトニアンに不定定数がある場合 1 -

不定定数 $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ を含んだハミルトニアン

$$\bar{H}(t) = \omega\bar{\sigma}_1 + u_1(t)\bar{\sigma}_3.\tag{2.56}$$

を持つ量子系. ここで $\omega^{(i)}$ と $\omega^{(f)}$ は $-\infty < \omega^{(i)} < \omega^{(f)} < \infty$ を満たし, 既知の値であるとする.

Example 2.7 のドリフトハミルトニアンは $\bar{H}_d(\omega) = \omega\bar{\sigma}_1$ となっている. これまで $-\bar{H}_d$ の制御性は量子回帰の法則を根拠としていたが, ω が連続不定定数の場合は全ての $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に対して回帰する時間 T の存在が必要である. 言い換えると $\bar{\mathbb{H}}_\infty := \lim_{N \rightarrow \infty} \bigoplus_{\omega \in \Omega_N} \bar{H}_d(\omega)$ に対する $-\bar{\mathbb{H}}_\infty$ の制御性を明らかにしたいが, 量子回帰の法則 Lemma 2.4 は無限次元系では適用できないため, $-\bar{H}_d(\omega)$ が制御性を示すことができない. しかし, 開放系に対する制御理論で使われる手法である以下の方法 [39, 40] を用いてこの制御性を明らかにできる.

Lemma 2.6 - Lie wedge -

与えられたハミルトニアンの集合 $(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c)$ に対して

$$\pm\bar{H}, \bar{G} \in \mathcal{L}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c) \Rightarrow e^{\bar{H}}\bar{G}e^{-\bar{H}} \in \mathcal{L}(\bar{H}_d, \mathcal{S}_c). \quad (2.57)$$

Lemma 2.6 の証明— $e^{\pm\bar{H}}$ はユニタリであり, $e^{\bar{H}}e^{-\bar{H}} = \mathbb{1}$ となることから, \bar{G} のダイナミクスの前後に $e^{\pm\bar{H}}$ を挟むことで

$$e^{\bar{H}}e^{\bar{G}t}e^{-\bar{H}} = \exp\left\{e^{\bar{H}}\bar{G}e^{-\bar{H}}\right\} \quad (2.58)$$

となることから, $e^{\bar{H}}\bar{G}e^{-\bar{H}}$ が制御できる. □

いま, 任意の制御パルス $u_1(t)$ が実行可能としているので Dirac のデルタ関数 $\delta(t)$ を選ぶと, $\pm\bar{\sigma}_3 \in \mathcal{L}(\omega\bar{\sigma}_1, \{\bar{\sigma}_3\})$ となることがわかり, これにより式 (1.7) の Z ゲートが実行でき, さらに Lemma 2.6 から $-\omega\bar{\sigma}_1 = Z(\omega\bar{\sigma}_1)Z \in \mathcal{L}(\omega\bar{\sigma}_1, \{\bar{\sigma}_3\})$ が得られる. よって, $\pm\omega\bar{\sigma}_1$ も制御可能であることがわかり, 交換子公式を使うことができる. つまり,

$$\begin{aligned} \omega\bar{\sigma}_2 &= [\bar{\sigma}_3, \omega\bar{\sigma}_1] \in \mathcal{L}(\omega\bar{\sigma}_1, \{\bar{\sigma}_3\}), \\ \omega^2\bar{\sigma}_3 &= [\omega\bar{\sigma}_1, \omega\bar{\sigma}_2] \in \mathcal{L}(\omega\bar{\sigma}_1, \{\bar{\sigma}_3\}) \end{aligned} \quad (2.59)$$

が得られる. Example 2.6 の系のと看と同様に $m \in \mathbb{N}$ に対して

$$\begin{aligned} \pm(-1)^m \omega^{4m+1} \bar{\sigma}_1 &= \underbrace{\text{ad}_{\omega^2 \bar{\sigma}_3} \circ \cdots \circ \text{ad}_{\omega^2 \bar{\sigma}_3}}_{2m} (\pm \omega \bar{\sigma}_1) \in \mathcal{L}(\omega \bar{\sigma}_1, \{\bar{\sigma}_3\}), \\ \pm(-1)^m \omega^{4m+1} \bar{\sigma}_2 &= \underbrace{\text{ad}_{\omega^2 \bar{\sigma}_3} \circ \cdots \circ \text{ad}_{\omega^2 \bar{\sigma}_3}}_{2m} (\pm \omega \bar{\sigma}_2) \in \mathcal{L}(\omega \bar{\sigma}_1, \{\bar{\sigma}_3\}), \end{aligned} \quad (2.60)$$

$$\begin{aligned} \mp(-1)^m \omega^{4m-1} \bar{\sigma}_2 &= \underbrace{\text{ad}_{\omega^2 \bar{\sigma}_3} \circ \cdots \circ \text{ad}_{\omega^2 \bar{\sigma}_3}}_{2m-1} (\pm \omega \bar{\sigma}_1) \in \mathcal{L}(\omega \bar{\sigma}_1, \{\bar{\sigma}_3\}), \\ \pm(-1)^m \omega^{4m-1} \bar{\sigma}_1 &= \underbrace{\text{ad}_{\omega^2 \bar{\sigma}_3} \circ \cdots \circ \text{ad}_{\omega^2 \bar{\sigma}_3}}_{2m-1} (\pm \omega \bar{\sigma}_2) \in \mathcal{L}(\omega \bar{\sigma}_1, \{\bar{\sigma}_3\}) \end{aligned} \quad (2.61)$$

となることから, $\omega^{(i)} \omega^{(f)} > 0$ のときは多項式近似を用いることで $\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2 \in \mathcal{L}(\omega \bar{\sigma}_1, \{\bar{\sigma}_3\})$ が得られ, 不定定数 $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に対して完全ロバスト制御可能であることがわかる.

以上のようにパルス幅と比べて強度の強いデルタ関数的な制御パルスを使うことができれば, 1量子ビット系では多くの場合ドリフトハミルトニアンを反転することができ, 多項式近似を用いることでロバスト制御可能であることを示すことができる. 最後に以下の系を取り上げる.

Example 2.8 - ドリフトハミルトニアンに不定定数がある場合 2 -

不定定数 $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ を含んだハミルトニアン

$$\bar{H}(t) = \bar{\sigma}_1 + \omega \bar{\sigma}_2 + u_1(t) \bar{\sigma}_3. \quad (2.62)$$

を持つ量子系. ここで $\omega^{(i)}$ と $\omega^{(f)}$ は $-\infty < \omega^{(i)} < \omega^{(f)} < \infty$ を満たし, 既知の値であるとする.

Example 2.8 はドリフトハミルトニアンが $\bar{H}_d(\omega) = \bar{\sigma}_2 + \omega \bar{\sigma}_2$ で与えられる系であり, 制御ハミルトニアンは $\mathcal{S}_c = \{\bar{\sigma}_3\}$ である. この $\bar{H}_d(\omega)$ に関して Example 2.7 の系のと看と同様に量子回帰の法則による $-\bar{H}_d(\omega)$ の制御性は示されないが, $\pm \bar{\sigma}_3 \in \mathcal{L}(\bar{\sigma}_1 + \omega \bar{\sigma}_2, \{\bar{\sigma}_3\})$ であることから Lemma 2.6 を用いて, $-(\bar{\sigma}_1 + \omega \bar{\sigma}_2) = Z(\bar{\sigma}_1 + \omega \bar{\sigma}_2)Z \in \mathcal{L}(\bar{\sigma}_1 + \omega \bar{\sigma}_2, \{\bar{\sigma}_3\})$ が示され, $-\bar{H}_d(\omega)$ が制御可能であることが確認できる. 従って交換子公式から

$$\begin{aligned} \bar{H}'(\omega) &:= \bar{\sigma}_2 - \omega \bar{\sigma}_1 = [\bar{\sigma}_3, \bar{\sigma}_1 + \omega \bar{\sigma}_2] \in \mathcal{L}(\bar{\sigma}_1 + \omega \bar{\sigma}_2, \{\bar{\sigma}_3\}), \\ (1 + \omega^2) \bar{\sigma}_3 &= [\bar{\sigma}_1 + \omega \bar{\sigma}_2, \bar{\sigma}_2 - \omega \bar{\sigma}_1] \in \mathcal{L}(\bar{\sigma}_1 + \omega \bar{\sigma}_2, \{\bar{\sigma}_3\}), \end{aligned} \quad (2.63)$$

が得られ, Trotter 公式から $\omega^2 \bar{\sigma}_3$ が制御可能であることが得られる. $\bar{H}_d(\omega)$ と $\bar{H}'(\omega)$ に対する $\omega^2 \bar{\sigma}_3$ の多重交換子から, 任意の $m \in \mathbb{N}$ に対して $\omega^{2m} \bar{H}_d(\omega)$, $\omega^{2m} \bar{H}'(\omega) \in$

$\mathcal{L}(\bar{\sigma}_1 + \omega\bar{\sigma}_2, \{\bar{\sigma}_3\})$ となることがわかる. 従って $x \in \mathbb{R}$ に対する任意の多項式関数 $f(x), g(x)$ とすると,

$$\begin{aligned} & f(\omega^2)\bar{H}_d(\omega) + g(\omega^2)\bar{H}' \\ &= (f(\omega^2) - \omega g(\omega^2))\bar{\sigma}_1 + (g(\omega^2) + \omega f(\omega^2))\bar{\sigma}_2 \end{aligned} \quad (2.64)$$

が制御可能となる. ロバスト制御の実装には任意の定数 $\theta_1, \theta_2 \in \mathbb{R}$ に対して, $f(\omega^2) - \omega g(\omega^2) = \theta_1$ と $g(\omega^2) + \omega f(\omega^2) = \theta_2$ を同時に満たせる必要があるので,

$$f(\omega^2) = \frac{\theta_1 + \omega\theta_2}{1 + \omega^2}, \quad g(\omega^2) = \frac{\theta_2 - \omega\theta_1}{1 + \omega^2} \quad (2.65)$$

が要求される. $\omega^{(i)}\omega^{(f)} \geq 0$ となっている場合は, 全ての $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ が常に $\omega = \sqrt{\omega^2}$ か $-\omega = \sqrt{\omega^2}$ のどちらかに属するため, 式 (2.65) の右辺にある ω は任意の精度で ω^2 の多項式関数で近似できる. よって $f(\omega^2)$ と $g(\omega^2)$ はそれぞれ ω^2 の多項式によって近似できるので, $\theta_1\bar{\sigma}_1 + \theta_2\bar{\sigma}_2 \in \mathcal{L}(\bar{\sigma}_1 + \omega\bar{\sigma}_2, \{\bar{\sigma}_3\})$ が示され, Example 2.8 の系は不定定数 $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ ($\omega^{(i)}\omega^{(f)} \geq 0$) に対して完全ロバスト制御可能であることがわかる.

Example 2.6-2.8 の全ての系に関して完全ロバスト制御可能となるためには ω の値域を定める $\omega^{(i)}, \omega^{(f)}$ が $\omega^{(i)}\omega^{(f)} > 0$ を満たす必要があるが, これらの条件は Theorem 2.2 からも明らかである. 例えば Example 2.7 の系では, $\omega = 0$ のときは明らかに完全制御可能とならない. また $\omega^{(i)}\omega^{(f)} < 0$ のとき, つまり $\omega^{(i)} < 0 < \omega^{(f)}$ では, $\pm\xi \in [\omega_0, \omega_1]$ を満たす $\xi > 0$ が存在し, $\bar{H} \in \mathfrak{su}(2)$ に対する同型写像を $F_z(\bar{H}) = Z\bar{H}Z$ とすると, $\bar{H}_d(\xi) = F_z(\bar{H}_d(-\xi))$ かつ $\bar{\sigma}_3 = F_z(\bar{\sigma}_3)$ となることから, $\omega = \pm\xi$ を持つ系は Theorem 2.2 の (2) の条件を破る. 従って, これらの系はロバスト制御ができないことがわかり, $\omega^{(i)}\omega^{(f)} > 0$ が条件となることが理解できる.

2.3 数値解析よる制御パルスの最適化アルゴリズム

以上までは系のハミルトニアンが与えられた際に, 原理的に実装できる量子ゲートの集合またはシミュレートできるハミルトニアンダイナミクスの集合が Lie 代数的なアプローチを用いて解析的に求まることを示した. しかし Lie 代数的な, 特に交換子公式を用いた量子系の制御の実装は, 第 3.1.4 項でも確認するように操作の実行時間が非常に長くなることが知られており, ハミルトニアンがわかっている系に対する量子ゲートの実装に用いるには効率的ではない [45–51]. そこで与えられた量子系に対して目的の量子ゲート

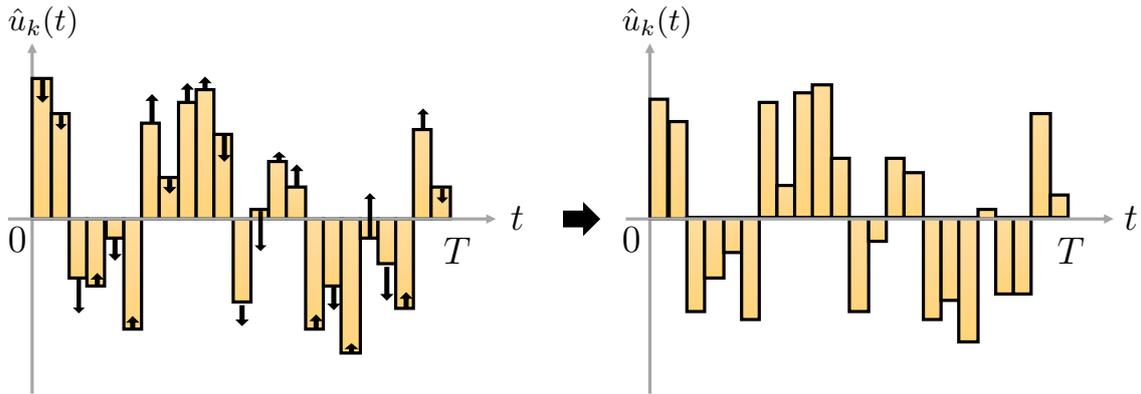


図 2.1 扱う制御パルス $u_k(t)$ の波形. 時間を与えられたスロット数で分割し, 各区間では定数となっている. GRAPE アルゴリズムでは目的の制御を実装するために各スロットの強さを図の左から右への流れのように整形していく.

U_{targ} を実装するのに必要な制御パルスを探査するアルゴリズムが開発されてきた [27]. これらのアルゴリズムは, 試行的に与えた制御パルスが実行する量子ゲートの情報を用いて徐々に目的の量子ゲート U_{targ} (ターゲットユニタリ) を実行するように整形していくものであり, 最適化アルゴリズムと呼ばれる. 第 2.3.1 項は, 最適化アルゴリズムのうちで本研究で用いる gradient ascent pulse engineering (GRAPE) アルゴリズム [73] を紹介する. その他のアルゴリズムは第 2.3.2 項で紹介する.

2.3.1 GRAPE アルゴリズム

本項では GRAPE アルゴリズムの内容と特徴について解説する. まず式 (2.1) で与えられるハミルトニアン $H(t)$ を持つ系に対してある目的の量子ゲート U_{targ} を実行したいとする. 本節のハミルトニアンはエルミート行列で表現する.

GRAPE アルゴリズムで探索する制御パルス $\{u_k(t)\}_{k=1}^K$ は時間 t に対して区分的に定義された関数であり, また各領域で定数となっている. (図 2.1 参照) GRAPE アルゴリズムに, 予め操作の実行時間 T と, この時間の分割数 N_{st} を定めておき, 試行制御パルス $\hat{u}_k(t)$ (図 2.1 左) を与えることで目的の量子ゲートを実行するためにパルスの形を整形し, 制御パルスを最適化していく (図 2.1 右). 以後 T と N_{st} をそれぞれ操作時間とスロット数と呼ぶことにする. 以下ではその整形方法について解説する.

最初に任意の $k \in [K]$ と $j \in [N_{\text{st}}]$ に対して $u_k[j] := \hat{u}_k((j - \frac{1}{2})T/N_{\text{st}})$ と定義する. ここで $\hat{u}_k(t)$ は初期に定めた試行制御パルスであり, K は式 (2.1) にある制御ハミルトニアンの個数である. このときすべての $\tau \in [(j - 1)T/N_{\text{st}}, jT/N_{\text{st}})$ に対して $\hat{u}_k(\tau) = u_k[j]$

が成り立つ。今、 $\Delta t := T/N_{\text{st}}$ とし、さらに $j \in [N_{\text{st}}]$ に対して

$$\hat{H}_j := H_d + \sum_{k=1}^K u_k[j] H_c^{(k)} \quad (2.66)$$

$$\hat{U}_j := \exp \left\{ -i\Delta t \hat{H}_j \right\} \quad (2.67)$$

を定義する。 \hat{U}_j を用いて試行制御パルス $\hat{u}_k(t)$ によって実行される量子ゲート $\hat{U}(T)$ を表すと

$$\hat{U}(T) = \mathcal{T} \prod_{j=1}^{N_{\text{st}}} \hat{U}_j = \hat{U}_{N_{\text{st}}} \hat{U}_{N_{\text{st}}-1} \times \cdots \times \hat{U}_1 \quad (2.68)$$

となる。ここで \mathcal{T} は時間順序演算子である。得られた量子ゲート $\hat{U}(T)$ と目的の量子ゲート U_{targ} の差異は絶対位相の違いが量子系に影響を及ぼさないことから

$$D(\hat{U}(T); U_{\text{targ}}) := \min_{\varphi \in [0, 2\pi)} \|U_{\text{targ}} - e^{i\varphi} \hat{U}(T)\|_2 \quad (2.69)$$

によって評価し、アルゴリズムによって $D(\hat{U}(T); U_{\text{targ}})$ を小さくすることを目的とする。まず、

$$\begin{aligned} D^2(\hat{U}(T); U_{\text{targ}}) &= \min_{\varphi \in [0, 2\pi)} \|U_{\text{targ}} - e^{i\varphi} \hat{U}(T)\|_2^2 \\ &= \|U_{\text{targ}}\|_2^2 + \|\hat{U}(T)\|_2^2 - 2 \max_{\varphi \in [0, 2\pi)} \text{Re} \left\{ e^{i\varphi} \text{Tr}(U_{\text{targ}}^\dagger \hat{U}(T)) \right\} \\ &= \|U_{\text{targ}}\|_2^2 + \|\hat{U}(T)\|_2^2 - 2 \left| \text{Tr}(U_{\text{targ}}^\dagger \hat{U}(T)) \right| \end{aligned} \quad (2.70)$$

となることから、最後の式の第3項を大きくすることで $D(\hat{U}(T); U_{\text{targ}})$ を小さくできることがわかる。よって $\hat{\Phi}(\hat{U}(T); U_{\text{targ}}) := |\text{Tr}(U_{\text{targ}}^\dagger \hat{U}(T))|^2$ とし、任意の $j \in [N_{\text{st}}]$ に対して

$$\hat{P}_j := U_{\text{targ}}^\dagger \times \mathcal{T} \prod_{l=j+1}^{N_{\text{st}}} \hat{U}_l, \quad \hat{Q}_j := \mathcal{T} \prod_{l=1}^j \hat{U}_l \quad (2.71)$$

とすると、任意の行列 A に対して $(\text{Tr}(A))^* = \text{Tr}(A^\dagger)$ となることから、

$$\begin{aligned} \hat{\Phi}(\hat{U}(T); U_{\text{targ}}) &= \text{Tr}(U_{\text{targ}}^\dagger \hat{U}(T)) \times \text{Tr}(\hat{U}^\dagger(T) U_{\text{targ}}) \\ &= \text{Tr}(\hat{P}_j \hat{Q}_j) \times \text{Tr}(\hat{Q}_j^\dagger \hat{P}_j^\dagger) \end{aligned} \quad (2.72)$$

のように記述できる．ここで，ある $k \in [K]$ と $j \in [N_{\text{st}}]$ に注目して $u_k[j] \rightarrow u_k[j] + \delta u_k[j]$ とすると，

$$\begin{aligned} \frac{\delta \hat{\Phi}}{\delta u_k[j]} &= \text{Tr} \left(\hat{P}_j \frac{\delta \hat{Q}_j}{\delta u_k[j]} \right) \times \text{Tr}(\hat{Q}_j^\dagger \hat{P}_j^\dagger) + \text{Tr}(\hat{P}_j \hat{Q}_j) \times \text{Tr} \left(\frac{\delta \hat{Q}_j^\dagger}{\delta u_k[j]} \hat{P}_j^\dagger \right) \\ &= 2\text{Re} \left[\text{Tr} \left(\hat{P}_j \frac{\delta \hat{U}_j}{\delta u_k[j]} \hat{Q}_{j-1} \right) \times \text{Tr}(\hat{Q}_j^\dagger \hat{P}_j^\dagger) \right] \end{aligned} \quad (2.73)$$

となる．また $\hat{U}_j \rightarrow \hat{U}_j + \delta \hat{U}_j = \exp\{-i\Delta t(\hat{H}_j + \delta u_k[j]H_c^{(k)})\}$ となることと，任意の行列 A, B に対して

$$\frac{d}{dx} \exp(A + xB) \Big|_{x=0} = \int_0^1 e^{yA} B e^{(1-y)A} dy \quad (2.74)$$

となること [74] を用いると

$$\begin{aligned} \frac{\delta \hat{U}_j}{\delta u_k[j]} &= -i \left[\int_0^1 e^{-iy\hat{H}_j\Delta t} H_c^{(k)} e^{iy\hat{H}_j\Delta t} (dy\Delta t) \right] \hat{U}_j \\ &= -i \left[\int_0^{\Delta t} e^{-i\hat{H}_j\tau} H_c^{(k)} e^{i\hat{H}_j\tau} d\tau \right] \hat{U}_j \end{aligned} \quad (2.75)$$

となる．ここで $\|\hat{H}_j\|\Delta t \ll 1$ を仮定し， Δt の一次まで注目すると

$$\int_0^{\Delta t} e^{-i\hat{H}_j\tau} H_c^{(k)} e^{i\hat{H}_j\tau} d\tau \approx \int_0^{\Delta t} \left(H_c^{(k)} + i[H_c^{(k)}, \hat{H}_j]\tau \right) d\tau \approx H_c^{(k)} \Delta t \quad (2.76)$$

となることから，

$$\frac{\delta \hat{\Phi}}{\delta u_k[j]} = -2\Delta t \text{Re} \left[\text{Tr} \left(i\hat{P}_j H_c^{(k)} \hat{Q}_j \right) \times \text{Tr}(\hat{Q}_j^\dagger \hat{P}_j^\dagger) \right] \quad (2.77)$$

が得られる．よって十分小さい $\epsilon > 0$ を用いて

$$u_k[j] \rightarrow u_k[j] + \epsilon \frac{\delta \hat{\Phi}}{\delta u_k[j]} \quad (2.78)$$

とすることで $\hat{\Phi}$ が大きくなるような傾向に変換することができ，より高い精度で目的の量子ゲートを実装するための制御パルス整形を行うことができる．さらに得られた制御パルスを基にして，同様に式 (2.77) を計算することで再度パルス整形ができ，これらの過程を繰り返すことで制御パルスの最適化を実行することができる．このアルゴリズムは初期に与えた試行制御パルス $\hat{u}_k(t)$ によって得られる最終結果が異なるため，場合に

よっては初期条件をいろいろ試みることでより制度の高い目的の制御パルスが得られることがあることに注意する。

最後に系のハミルトニアンと目的の量子ゲートが与えられた下での GRAPE アルゴリズムの大きな流れをまとめる。

Procedure 2.2 - 目的の量子ゲートを実装するための GRAPE アルゴリズム -

1. スロット数 N_{st} とそれに対応した試行制御パルス $\hat{u}_k[j]$ ($j \in [N_{\text{st}}], k \in [K]$) を定める。
2. すべての $j \in [N_{\text{st}}]$ に対して式 (2.71) の \hat{P}_j, \hat{Q}_j を計算する。
3. 式 (2.77) に従って, すべての $j \in [N_{\text{st}}], k \in [K]$ に対して $\delta\hat{\Phi}/\delta\hat{u}_k[j]$ を求め, 式 (2.78) に従って制御パルスの最適化を行う。ここで ϵ は $D(\hat{U}(T); U_{\text{targ}})$ が元の値より小さくなるように $\epsilon > 0$ を適当に選ぶ。
4. 2. に戻る。

GRAPE アルゴリズムによって制御パルスを最適化をする際のアルゴリズムの終了条件は, (1) 目的の精度に達成する, (2) Procedure 2.2 の 2.-4. のステップ数が特定の (上限) 回数に達する, (3) 特定の時間 (アルゴリズムの実行時間) に達する, (4) ϵ がある値よりも小さくなる; などの条件を組み合わせることによって定め, 数値計算を実行することになる [75, 76].

2.3.2 QuTiP とその他のアルゴリズム

前項で紹介した GRAPE アルゴリズムによる制御パルスの最適化法は, 式 (2.71) で定義した \hat{P}_j, \hat{Q}_j を求めることで実行できる。 \hat{P}_j, \hat{Q}_j は \hat{U}_j によって分解されるが, これは時間依存しないハミルトニアンの時間発展 (式 (2.67)) によって導出されることから, 数値的には比較的簡単に求めることができる。代表的な例として, QuTiP のパッケージ [75, 76] では GRAPE アルゴリズムを効率的に解けるように最適化されている。本研究でこのパッケージを用いてロバスト制御パルスの導出を行う (第 3.2 節)。

上記のように GRAPE アルゴリズムは数値解析との相性の面で有効であることが確認されたが, 一方でこのアルゴリズムで得られる制御パルスは時間に対する強度変化が大きいため, この制御パルスをそのまま実験系で実装することが困難であるという問題が生じる。そこで制御パルスの条件として滑らかであることを課した上で最適化を行う

アルゴリズムもある [27]. 例えば, 制御パルスに周期性をもたせることで Floquet 理論を適応できるようにし, Floquet 理論の特性を用いることによってによってダイナミクスをシミュレートし最適化する方法がある [32, 77]. その他に, 特定の量子状態に対する変換を最適化するアルゴリズム [78] を量子ゲートに対する変換アルゴリズムに改良したものの [79] や, 滑らかな制御パルスによる時間発展を数値的な積分によって求め, 与えられた制御パルスに対する拘束条件を満たす中で最適化できる GOAT(Gradient Optimisation of Analytical control) アルゴリズム [80] も提案されている.

これらのアルゴリズムを用いることで, 実験系の性質に即した制御パルスの探索が可能となることが期待できるが, GRAPE アルゴリズムよりも計算コストが大きくなる問題がある. 本研究では原理的に制御可能かということを主に解析するため, 制御できるパラメータの数 (スロット数) が多く, また計算コストが比較的小さい GRAPE アルゴリズムを用いることにする.

その他にもさまざまな手法によって制御パルスを導く方法が提案されており, 例えば凸最適法を用いた手法 [81] や学習法を用いた手法 [82–84], 特定の多体系に対する解析を得意とする CRAB(Chopped Random Basis) アルゴリズム [85] などもある.

第 3 章

2 量子ビットに対するロバスト制御

本章では 2 量子ビットに対するロバスト制御を考察する. 2 量子ビット以上の系では, 非自明な単純代数でない代数を生成するハミルトニアン系や, 連続不定定数を持ったドリフトハミルトニアン \bar{H}_d の反転 ($-\bar{H}_d$) が 1 量子ビット系のときのように実行できない場合が存在する. 本研究ではこのような系に対してロバスト制御が可能であるかどうかを解析的なアプローチと数値的なアプローチの 2 つの方向から解析を行う.

1 量子ビット系の連続不定定数に対するロバスト制御が可能となる条件は多くの場合, その値域がゼロを跨がない場合であった. この傾向は多くの 2 量子ビット系でも見られるため, $\Omega_0 \subset \mathbb{R}^2$ を任意の $(a, b) \in \Omega_0$ に対して $ab > 0$ かつ $a < b$ を満たす集合に制限し, これが値域の境界となる不定定数に対するロバスト制御を解析する.

3.1 多項式近似を用いたロバスト制御可能性の証明

本節ではある有限領域内の連続不定定数に対して, 完全ロバスト制御が可能な 2 量子ビット系が存在することを多項式近似を用いて示す (第 3.1.1 項). また, 第 3.1.2 項では解析的な方法でロバスト制御が可能であるか明らかにできない例を与える. この例は第 3.2 節で行う数値計算によってロバスト制御可能性について考察を行う. 第 3.1.3 項では与えられたハミルトニアンによって生成される代数が単純代数でない場合, つまり Theorem 2.2 の (1) を満たさない場合のロバスト制御について解析を行う.

3.1.1 連続不定定数に対するロバスト制御が可能な系とその証明

ここでは連続不定定数に対して完全ロバスト制御可能な2量子ビット系の例を5つ提示し、その証明を行う。最初の2つの例は制御ハミルトニアンを1つ持ち、不定定数がドリフトハミルトニアンの局所項に付くもの (Example 3.1) と大局項に付くもの (Example 3.2) について解析する。残りの3つは制御ハミルトニアンが複数ある場合を扱い、Heisenberg 相互作用の強さが不定である系 (Example 3.3) や不定定数が複数ある系 (Example 3.4, 3.5) に対するロバスト制御性を示す。

Example 3.1 - ドリフトハミルトニアンの局所項に連続不定定数が付く場合 -

不定定数 $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ を含んだハミルトニアン

$$\begin{aligned}\bar{H}(t) &= \omega \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1} + i(\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2 + \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3) + u_1(t) \bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}, \\ \bar{H}_d(\omega) &= \omega \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1} + i(\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2 + \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3), \\ \mathcal{S}_c &= \{\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}\}.\end{aligned}\tag{3.1}$$

を持つ量子系。ここで $(\omega^{(i)}, \omega^{(f)}) \in \Omega_0$ であり、これらは既知の値とする。

Example 3.1 の系では以下のハミルトニアンが制御できる。

$$\bar{H}_d(\omega) \quad \text{and} \quad \pm \bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1},\tag{3.2a}$$

$$-\bar{H}_d(\omega) + 2i\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3 \quad \text{and} \quad \pm i\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3,\tag{3.2b}$$

$$-\bar{H}_d(\omega) \quad \text{and} \quad \pm \omega \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1},\tag{3.2c}$$

$$\pm i(\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2 + \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3).\tag{3.2d}$$

式 (3.2a) のハミルトニアンは $u_1(t)$ としてデルタ関数を選ぶことで制御可能となる。従って Lemma 2.6 から $(Z \otimes \mathbf{1})[\bar{H}_d(\omega)](Z \otimes \mathbf{1}) = -\bar{H}_d(\omega) + 2i\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3$ が制御可能であることがわかり、Trotter 公式によって $i\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3$ が制御可能となる。また $i\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3$ は有限次元ハミルトニアンなので量子回帰の法則が適用できるため式 (3.2b) が得られる。ここから Trotter 公式によって $-\bar{H}_d(\omega)$ の制御性が得られ、 \bar{H}_d に関して交換子公式が使えるようになるので

$$\pm \omega \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1} = 4[i\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3, [i\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3, \mp \bar{H}_d(\omega)]]\tag{3.3}$$

から式 (3.2c) のハミルトニアンが制御可能であることがわかり、式 (3.2d) もまた Trotter 公式から制御可能であることがわかる。

以上の結果から、 $\pm\omega\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}$ と $\pm\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}$ が制御可能であることがわかり、Example 2.7の系の結果を用いることで、 $(\omega^{(i)}, \omega^{(f)}) \in \Omega_0$ を満たす $[\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に対して $\pm\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}$ がロバスト制御可能であることがわかる。従って、 $\pm\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}$ 、 $\pm\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}$ と2量子ビットの Heisenberg 相互作用 (3.2d) が制御可能なので Example 2.3 の系の制御性から、Example 3.1 の系は $[\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に対して完全ロバスト制御可能であることが示される。

この系と全く同様の手順によって、ドリフトハミルトニアンが

$$\bar{H}_d(\omega) = \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1} + \omega\bar{\sigma}_2 \otimes \mathbf{1} + i(\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2 + \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3) \quad (3.4)$$

である場合に関しても、不定定数 $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に対して完全ロバスト制御が可能である。つまり、式 (3.2c) の右側のハミルトニアンを除いた式 (3.2a)-(3.2d) のハミルトニアンが Example 3.1 と同様の手順で制御可能であることが示せる。また式 (3.2c) に関しては、 $\omega\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1} \rightarrow \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1} + \omega\bar{\sigma}_2 \otimes \mathbf{1}$ のようになる。ハミルトニアン $\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1} + \omega\bar{\sigma}_2 \otimes \mathbf{1}$ と $\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}$ の制御は Example 2.8 の結果から $(\omega^{(i)}, \omega^{(f)}) \in \Omega_0$ のときは $\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}$ のロバスト制御が可能であることが確認されているので、ドリフトハミルトニアンが式 (3.4) である場合でも $[\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に対して完全ロバスト制御可能であることが確認される。

Example 3.1 の系のように、2量子ビットの系でも完全ロバスト制御が可能となる場合があることがわかった。 $\bar{H}_d(\omega)$ を反転したハミルトニアン $-\bar{H}_d(\omega)$ の制御性は1量子ビットのときと異なり、制御ハミルトニアンのデルタ関数制御パルスによって得ることはできず、これを示すのに数ステップ必要となる。このように連続不定定数に関するロバスト制御の可能性を解析的に証明するにはドリフトハミルトニアンの反転を示すことができるかが非常に重要となる。

以上で扱った2つの系は局所ハミルトニアン ($\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}$) の項に不定定数が付いた系であるが、不定定数が局所ハミルトニアンにしか含まれないことはロバスト制御に必要な条件ではなく、大局的なハミルトニアンに対して不定定数が付く場合で可能な場合がある。以下の系がその例である。

Example 3.2 - ドリフトハミルトニアンの大局項に連続不定定数が付く場合 -

不定定数 $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ を含んだハミルトニアン

$$\begin{aligned} \bar{H}(t) &= \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_1 + i\omega(\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2) + u_1(t)\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}, \\ \bar{H}_d(\omega) &= \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_1 + i\omega(\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2), \\ \mathcal{S}_c &= \{\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}\}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

を持つ量子系. ここで $(\omega^{(i)}, \omega^{(f)}) \in \Omega_0$ であり, これらは既知の値とする.

Example 3.2 の系に対して以下のハミルトニアンが制御できる.

$$\bar{H}_d(\omega) \quad \text{and} \quad \pm \bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}, \quad (3.6a)$$

$$-\bar{H}_d(\omega) + 2\mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_1 \quad \text{and} \quad \pm \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_1, \quad (3.6b)$$

$$-\bar{H}_d(\omega) \quad \text{and} \quad \pm i\omega \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2, \quad (3.6c)$$

$$\pm i\omega \bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1 \quad \text{and} \quad \pm \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}. \quad (3.6d)$$

式 (3.6a)-(3.6c) のハミルトニアンの制御性を導く手順は式 (3.2a)-(3.2c) のものと同様, つまり $\pm i\omega \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2 = [\mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_1, [\mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_1, \mp \bar{H}_d(\omega)]]$ から得られる. また,

$$\bar{G}(\omega) := \bar{\sigma}_2 \otimes \mathbf{1} + \omega(\bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_1 - \bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_2) = [\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}, \bar{H}_d(\omega)] \quad (3.7)$$

とすると,

$$\begin{aligned} \pm \omega^2 \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_2 &= [\mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_1, [\bar{G}(\omega), \mp \bar{H}_d(\omega)]], \\ \pm \omega^2 \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_3 &= [\mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_1, \pm \omega^2 \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_2], \\ \pm \omega^4 \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_1 &= [\omega^2 \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_2, \pm \omega^2 \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_3] \end{aligned} \quad (3.8)$$

となるため, 交換子公式から $\pm \omega^4 \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_1$, $\pm \omega^2 \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_2$, $\pm \omega^2 \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_3$ も制御可能となる. よって任意の $n \in \mathbb{N}$ に対して

$$\begin{aligned} \pm \omega^{4n+2} \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_2 &= [\omega^4 \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_1, \mp \omega^{4n-2} \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_3], \\ \pm \omega^{4n+2} \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_3 &= [\omega^4 \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_1, \pm \omega^{4n-2} \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_2] \end{aligned} \quad (3.9)$$

となることから, 帰納的に $\omega^{4n+2} \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_2$ も制御可能であることが示される. よって $x \in \mathbb{R}$ の対する任意の多項式関数 $f(x)$ に対して, $\omega^2 f(\omega^4) \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_2$ が制御可能となり, $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に対しては Example 2.8 の系のときと同様に $f(\omega^4) \approx \frac{1}{\omega^2}$ となるように多項式近似をすることができ, $\mathbf{1} \otimes \mathfrak{su}(2)$ がロバスト制御可能であることがわかる. よって交換子公式 $\pm(\mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_1 + i\omega \bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1) = [\mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_2, [\mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_2, \mp \bar{H}_d(\omega)]]$ と Trotter 公式から式 (3.6d) のハミルトニアンが制御可能であることがわかる. また, $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に対する $\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1$, $\bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2$ のロバスト制御性は $\mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_2$ のロバスト制御性を導いた同様の方法で示せる. $\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}$, $\mathbf{1} \otimes \mathfrak{su}(2)$, $i\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1$ と $i\bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2$ の制御性は 2量子ビット系に対して完全制御可能なので (付録 B.1), Example 3.2 の系は $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に対して完全ロバスト制御可能である.

以上のように, 大局的なハミルトニアンに不定定数が付く場合でもロバスト制御が可能となりうることがわかった.

Example 3.3 - 制御ハミルトニアンが2つある場合 -

不定定数 $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ を含んだハミルトニアン

$$\begin{aligned}\bar{H}(t) &= i\omega(\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2 + \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3) + u_1(t)\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1} + u_2(t)\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}, \\ \bar{H}_d(\omega) &= i\omega(\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2 + \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3), \\ \mathcal{S}_c &= \{\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}, \bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}\}.\end{aligned}\tag{3.10}$$

を持つ量子系. ここで $(\omega^{(i)}, \omega^{(f)}) \in \Omega_0$ であり, これらは既知の値とする.

Example 3.3 の系では制御ハミルトニアン \mathcal{S}_c によって1量子ビット系に対しては完全制御可能であることに注意すると (式 (3.11a)), まず以下のハミルトニアンが制御可能であることがわかる.

$$\bar{H}_d(\omega) \quad \text{and} \quad \pm \bar{\sigma}_j \otimes \mathbf{1}, \tag{3.11a}$$

$$-\bar{H}_d(\omega) + 2i\omega \bar{\sigma}_j \otimes \bar{\sigma}_j, \tag{3.11b}$$

$$\pm i\omega \bar{\sigma}_j \otimes \bar{\sigma}_j. \tag{3.11c}$$

ここで $j = 1, 2, 3$ である. 式 (3.11b) のハミルトニアンは Lemma 2.6 を用いた $(2\bar{\sigma}_j)\bar{H}_d(\omega)(-2\bar{\sigma}_j) = -\bar{H}_d(\omega) + 2i\omega \bar{\sigma}_j \otimes \bar{\sigma}_j$ によって得られる. 最後に Trotter 公式によって式 (3.11c) のハミルトニアンの制御性が確認される. さらに任意の $n \in \mathbb{N}$ に対して

$$\begin{aligned}\pm i\omega^{2n+1}\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1 &= 4[\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}, [i\omega\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1, [i\omega\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1, [\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}, \pm i\omega^{2n-1}\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1]]]], \\ \pm i\omega^{2n+1}\bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2 &= 4[\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}, [i\omega\bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2, [i\omega\bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2, [\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}, \pm i\omega^{2n-1}\bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2]]]], \\ \pm i\omega^{2n+1}\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3 &= 4[\bar{\sigma}_2 \otimes \mathbf{1}, [i\omega\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3, [i\omega\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3, [\bar{\sigma}_2 \otimes \mathbf{1}, \pm i\omega^{2n-1}\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3]]]],\end{aligned}\tag{3.12}$$

となるので帰納的に $\pm i\omega^{2n+1}\bar{\sigma}_j \otimes \bar{\sigma}_j$ もまた制御可能となることがわかる. 従って, 奇関数を用いて定数に近似する多項式近似を用いることで, $(\omega^{(i)}, \omega^{(f)}) \in \Omega_0$ を満たす $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に対して $\bar{\sigma}_j \otimes \bar{\sigma}_j$ がロバスト制御可能となる. Trotter 公式によりハイゼンベルグ相互作用と $\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}$, $\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}$ の制御ができることがわかるので, Example 2.3 の結果から, Example 3.3 の系も $[\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に対して完全ロバスト制御可能であることが示せた.

Example 3.3 は Heisenberg 相互作用の強さが不定な系であるが, このような場合でも2つの局所的な制御ハミルトニアンがあれば制御可能なが示せた. ここで, 2つの制御ハミルトニアンが必要になるのは, Example 2.3 で $n = 2$, $h = 0$ のときに完全制御

が可能となるには2つの局所的な制御ハミルトニアンが必要になることと同様の理由によってである。

Example 3.4 - 不定定数と制御ハミルトニアンが2つある場合 -

2つの不定定数 $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$, $\nu \in [\nu^{(i)}, \nu^{(f)}]$ を含んだハミルトニアン

$$\begin{aligned}\bar{H}(t) &= \nu \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbb{1} + i\omega(\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2 + \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3) + u_1(t)\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbb{1} + u_2(t)\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbb{1}, \\ \bar{H}_d(\nu, \omega) &= \nu \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbb{1} + i\omega(\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2 + \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3), \\ S_c &= \{\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbb{1}, \bar{\sigma}_3 \otimes \mathbb{1}\}.\end{aligned}\tag{3.13}$$

を持つ量子系. ここで $(\omega^{(i)}, \omega^{(f)}) \in \Omega_0$ かつ $-\infty < \nu^{(i)} < \nu^{(f)} < \infty$ であり, これらは既知の値とする.

Example 3.4 の系で制御可能なハミルトニアンは $i\omega \bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1 \rightarrow \nu \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbb{1} + i\omega \bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1$ となることを除いて式 (3.11a)-(3.11c) と同じであり, $\bar{H}_d(\nu, \omega)$ が有界であることから Example 3.3 と同様の手順で得られる. 従って $i\bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2$ と $i\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3$ に関してはロバスト制御可能であることがわかり, $\pm \nu \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbb{1} = 4[i\bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2, [\nu \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbb{1} + \omega i\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1, \pm i\bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2]]$ となるので, 交換子公式から $\pm \nu \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbb{1}$ の制御性が得られる. よって Trotter 公式から式 (3.11a)-(3.11c) と全く同じハミルトニアンの制御が可能であることが示せたので, ν に関しては有界であれば任意の値域に対して完全ロバスト制御可能な系であることがわかる.

以上のように, Lindblad 型の時間発展をするような開放系に対する制御理論の中で使われる Lemma 2.6 などを使うことによってドリフトハミルトニアンの反転をうまく作り出し, 交換子公式から ω の高次の依存性があるハミルトニアンの制御性を示し, 多項式近似を用いることでロバスト制御性を示すことができた. また制御ハミルトニアンが2つある場合には, 2つの不定定数に対して完全ロバスト制御可能となる場合がある (Example 3.4) ことを確認した.

次に扱う系では, 系のドリフトハミルトニアンはほぼ不定であるが, 相互作用の不定定数領域の一つがある条件 (Ω_0) を満たし, 局所的に完全制御可能 (各量子ビットに対してのみ完全制御可能) である場合には, これらの不定性に対して完全ロバスト制御可能であることを示す.

Example 3.5 - 不定なドリフトハミルトニアンと局所的に完全制御可能な場合 -

不定定数 $\omega_{jk} \in [\omega_{jk}^{(i)}, \omega_{jk}^{(f)}]$ ($j, k = 0, 1, 2, 3$) を含んだハミルトニアン

$$\begin{aligned}\bar{H}(t) &= i \sum_{j,k=0}^3 \omega_{jk} \bar{\sigma}_j \otimes \bar{\sigma}_k + u_1(t) \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1} + u_2(t) \bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1} \\ &\quad + u_3(t) \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_1 + u_4(t) \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_3, \\ \bar{H}_d(\omega) &= i \sum_{j,k=0}^3 \omega_{jk} \bar{\sigma}_j \otimes \bar{\sigma}_k, \\ \mathcal{S}_c &= \{\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}, \bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}, \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_1, \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_3\}.\end{aligned}\tag{3.14}$$

を持つ量子系. ここで $\bar{\sigma}_0 = \mathbf{1}$ とし, すべての $j, k = 0, 1, 2, 3$ に対して $-\infty < \omega_{jk}^{(i)} < \omega_{jk}^{(f)} < \infty$ であり, これらは既知の値とする.

$-\bar{H}_d(\omega)$ の制御性は付録 B.2 で示すこととし, ここでは $-\bar{H}_d(\omega)$ が制御可能であることを仮定してこの系のロバスト制御可能性を示す. $\{(\omega_{jk}^{(i)}, \omega_{jk}^{(f)})\}_{j,k \in [3]}$ のどれか一つの要素が $\Omega_{\bar{0}}$ に属するとし, このときの j, k をそれぞれ j_*, k_* とする. また, 完全反対称テンソル ε_{jkl} を用いて, 関数 $\iota_{\pm}: [3] \rightarrow [3]$ を $\sum_{\mu=1}^3 \varepsilon_{\mu \iota_{\pm}(k)k} = \pm 1$ となるように定義する. このとき任意の $k \in [3]$ に対して $\varepsilon_{\iota_-(k)\iota_+(k)k} = 1$ となることに注意すると, $\pm \bar{\sigma}_l \otimes \mathbf{1}, \pm \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_l$ ($l = 1, 2, 3$) は制御可能なので,

$$\begin{aligned}\bar{H}_1(\omega) &:= [\bar{\sigma}_{\iota_+(j_*)} \otimes \mathbf{1}, \bar{H}_d(\omega)] = i \sum_{k=0}^3 (\omega_{j_*k} \bar{\sigma}_{\iota_-(j_*)} \otimes \bar{\sigma}_k - \omega_{\iota_-(j_*)k} \bar{\sigma}_{j_*} \otimes \bar{\sigma}_k), \\ \bar{H}_2(\omega) &:= [\bar{\sigma}_{j_*} \otimes \mathbf{1}, \bar{H}_1(\omega)] = i \sum_{k=0}^3 \omega_{j_*k} \bar{\sigma}_{\iota_+(j_*)} \otimes \bar{\sigma}_k, \\ \bar{H}_3(\omega) &:= [\mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_{\iota_+(k_*)}, \bar{H}_2(\omega)] = i \bar{\sigma}_{\iota_+(j_*)} \otimes (\omega_{j_*k_*} \bar{\sigma}_{\iota_-(k_*)} - \omega_{j_*\iota_-(k_*)} \bar{\sigma}_{k_*}),\end{aligned}\tag{3.15}$$

$$\bar{G}_1(\omega_{j_*k_*}) := \omega_{j_*k_*} \bar{\sigma}_{\iota_+(j_*)} \otimes \bar{\sigma}_{\iota_+(k_*)} = [\mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_{k_*}, \bar{H}_3(\omega)],\tag{3.16a}$$

$$\bar{G}_2(\omega_{j_*k_*}) := \omega_{j_*k_*} \bar{\sigma}_{j_*} \otimes \bar{\sigma}_{\iota_+(k_*)} = [\bar{\sigma}_{\iota_-(j_*)} \otimes \mathbf{1}, \bar{H}_3(\omega)],\tag{3.16b}$$

$$\bar{G}_3(\omega_{j_*k_*}) := \omega_{j_*k_*}^2 \bar{\sigma}_{\iota_-(j_*)} \otimes \mathbf{1} = 4[\bar{G}_2(\omega_{j_*k_*}), \bar{G}_1(\omega_{j_*k_*})]\tag{3.16c}$$

が交換子公式から制御可能である. 従って任意の $n \in \mathbb{N}$ に対して

$$\begin{aligned}(-1)^m \omega^{4n} \bar{G}_1(\omega_{j_*k_*}) &= \underbrace{\text{ad}_{\bar{G}_3(\omega_{j_*k_*})} \circ \cdots \circ \text{ad}_{\bar{G}_3(\omega_{j_*k_*})}}_{2n}(\bar{G}_1(\omega_{j_*k_*})), \\ (-1)^m \omega^{4n} \bar{G}_2(\omega_{j_*k_*}) &= \underbrace{\text{ad}_{\bar{G}_3(\omega_{j_*k_*})} \circ \cdots \circ \text{ad}_{\bar{G}_3(\omega_{j_*k_*})}}_{2n}(\bar{G}_2(\omega_{j_*k_*})),\end{aligned}\tag{3.17}$$

$$\begin{aligned}
(-1)^m \omega^{4n-2} \bar{G}_2(\omega_{j_* k_*}) &= \underbrace{\text{ad}_{\bar{G}_3(\omega_{j_* k_*})} \circ \cdots \circ \text{ad}_{\bar{G}_3(\omega_{j_* k_*})}}_{2n-1} (-\bar{G}_1(\omega_{j_* k_*})), \\
(-1)^m \omega^{4n-2} \bar{G}_1(\omega_{j_* k_*}) &= \underbrace{\text{ad}_{\bar{G}_3(\omega_{j_* k_*})} \circ \cdots \circ \text{ad}_{\bar{G}_3(\omega_{j_* k_*})}}_{2n-1} (\bar{G}_2(\omega_{j_* k_*}))
\end{aligned} \tag{3.18}$$

が制御可能になるため、帰納的に $\omega^{2n+1} \bar{\sigma}_{j_*} \otimes \bar{\sigma}_{l_+(k_*)}$ も制御でき、奇関数による多項式近似によって $[\omega_{j_* k_*}^{(i)}, \omega_{j_* k_*}^{(f)}]$ に対して $\bar{\sigma}_{j_*} \otimes \bar{\sigma}_{l_+(k_*)}$ がロバスト制御可能となることがわかる。このハミルトニアンと局所ハミルトニアン $\pm \bar{\sigma}_l \otimes \mathbf{1}$, $\pm \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_l$ ($l = 1, 2, 3$) の交換子によって任意の相互作用 $\bar{\sigma}_j \otimes \bar{\sigma}_k$ ($j, k = 1, 2, 3$) が制御可能となることから、Trotter 公式によって Example 3.5 の系が与えられた不定性の下で完全ロバスト制御可能であることが示せた。

以上の例から、局所的な完全制御性は系のロバスト制御の実現性を全系に拡大することがわかった。しかし、以上に示した例のロバスト制御性はすべて原理的に可能であることを示しているだけであり、実際に Example 3.4 と Example 3.5 へのロバスト制御パルスを見つけることができるかどうかについては明らかにしていない点に注意が必要である。

3.1.2 連続不定定数に対するロバスト制御可能性が不明瞭な系

第 3.1.1 項では連続不定定数に対してロバスト制御可能な 2 量子ビット系の例の存在を確認したが、多項式近似を用いた解析的な手法でロバスト制御性が示すことができない例も存在する。本項ではそれらの例を紹介する。

Example 3.6 - 2 量子ビット系でロバスト制御性が不明瞭な例 -

不定定数 $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ を含んだハミルトニアン

$$\begin{aligned}
\bar{H}(t) &= \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1} + i\omega(\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2 + \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3) + u_1(t) \bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}, \\
\bar{H}_d(\omega) &= \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1} + i\omega(\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2 + \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3), \\
\mathcal{S}_c &= \{\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}\}.
\end{aligned} \tag{3.19}$$

を持つ量子系。ここで $\omega^{(i)}$ と $\omega^{(f)}$ は $-\infty < \omega^{(i)} < \omega^{(f)} < \infty$ を満たし、既知の値であるとする。

Example 3.6 の系では Lemma 2.6 や Trotter 公式を用いることで

$$H_d(\omega) \quad \text{and} \quad \pm \bar{\sigma}_3, \tag{3.20a}$$

$$-H_d(\omega) + 2i\omega \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3 \quad \text{and} \quad \omega \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3. \tag{3.20b}$$

が制御可能であることが示せる。しかし、 $-\omega\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3$ の制御性は $\pm\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbb{1}$ を用いた Lemma 2.6 による制御性では明らかにならず、また ω は連続量なので量子回帰の法則による $-\omega\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3$ の制御性を示すことができない。従って交換子公式が適用できず、 ω の高次の項をもつハミルトニアン¹の制御性が明らかではなくなる。よって多項式近似によるロバスト制御性の証明ができないため、 $\pm\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbb{1}$ 以外のロバスト制御が可能なハミルトニアンが得られない。しかし、Lie 代数的な方法以外でロバスト制御ができる可能性もあるため、この考察のみでロバスト制御が不可能であることは明らかにならない。このハミルトニアンが生成するユニタリ行列の集合は半群の性質を持つため、Lie 代数 (Lie 群) の性質を用いた制御不可能の議論は使うことができない。

この例は 2 量子ビット系であるが、以下のように 1 量子ビット系でも同様の事態が起こることがある。

Example 3.7 - 1 量子ビット系でロバスト制御性が不明瞭な例 -

不定定数 $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ を含んだハミルトニアン

$$\begin{aligned}\bar{H}(t) &= \bar{\sigma}_1 + \omega\bar{\sigma}_3 + u_1(t)\bar{\sigma}_3, \\ \bar{H}_d(\omega) &= \bar{\sigma}_1 + \omega\bar{\sigma}_3, \\ \mathcal{S}_c &= \{\bar{\sigma}_3\}.\end{aligned}\tag{3.21}$$

を持つ量子系。ここで $\omega^{(i)}$ と $\omega^{(f)}$ は $-\infty < \omega^{(i)} < \omega^{(f)} < \infty$ を満たし、既知の値であるとする。

Example 3.7 の系では Lemma 2.6 と Trotter 公式を用いて $Z(\bar{H}_d(\omega))Z = -\bar{H}_d(\omega) + 2\omega\bar{\sigma}_3$ と $\omega\bar{\sigma}_3$ の制御性は示せる。しかし $-\omega\bar{\sigma}_3$ については Example 3.6 のときと同様の理由で制御性が明らかにならず、ロバスト制御性が多項式近似のアプローチによって証明できない。

Example 3.6, 3.7 のどちらの系にしても、 $[\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ を N 個に離散化した $\Omega_N \subset [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に関するロバスト制御は Theorem 2.2 の (1), (2) を満たすので実行することができる。しかし第 2.2.2 項で議論したように $N \rightarrow \infty$ としたときに有限時間で制御できるかどうかは明らかではなく、この方法でも連続不定定数の制御性が明らかにはならない。第 3.2 節では GRAPE アルゴリズムを用いた数値解析を行うことで N 個の離散化した不定定数に対するロバスト制御の実行にかかる最小時間などを分析し、連続不定定数に対するロバスト制御可能性について解析する。

3.1.3 単純代数ではない系のロバスト制御

ここまで扱ってきたすべての系は、不定定数 $\omega (\neq 0)$ が事前にわかっている場合では完全制御可能である。従って離散化した不定定数に関しては Theorem 2.2 の (1) を満たしている。本項では不定定数を離散化した際にその各系が完全制御可能でなく、また系のハミルトニアンが生成する Lie 代数が単純代数でない場合において、連続不定定数に対するロバスト制御性がどのようなになるか例を用いて解析を行う。

Example 3.8 - 単純代数を生成しないハミルトニアン系 -

不定定数 $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ を含んだハミルトニアン

$$\begin{aligned}\bar{H}(t) &= \omega \bar{\sigma}_3 \otimes \mathbb{1} + 2i \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3 + u_1(t) \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbb{1}, \\ \bar{H}_d(\omega) &= \omega \bar{\sigma}_3 \otimes \mathbb{1} + 2i \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3, \\ \mathcal{S}_c &= \{\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbb{1}\}.\end{aligned}\tag{3.22}$$

を持つ量子系。ここで $-\infty < \omega^{(i)} < \omega^{(f)} < \infty$ であり、これらは既知の値とする。

離散化 (N 分割) 不定定数 $\omega \in \Omega_N$ に対する Example 3.8 の系のロバスト制御について解析する。まず ω の値がわかっているとすると量子回帰の法則から $\pm \bar{H}_d(\omega)$ が制御できるので、Procedure 2.1 に従ってこの制御性を求めると、

$$\bar{h}_1(\omega) := \bar{\sigma}_2 \otimes (\omega \mathbb{1} + 2i \bar{\sigma}_3) = [\bar{H}_d(\omega), \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbb{1}] \in \mathcal{S}_1,\tag{3.23a}$$

$$\bar{h}_2(\omega) := \bar{\sigma}_1 \otimes ((\omega^2 + 1) \mathbb{1} + 4i \omega \bar{\sigma}_3) = -[\bar{H}_d(\omega), \bar{h}_1(\omega)] \in \mathcal{S}_2,\tag{3.23b}$$

$$\bar{h}_3(\omega) := \bar{\sigma}_2 \otimes (\omega(\omega^2 + 3) \mathbb{1} + 2i(3\omega^2 + 1) \bar{\sigma}_3) = [\bar{H}_d(\omega), \bar{h}_2(\omega)] \in \mathcal{S}_3,\tag{3.23c}$$

$$\bar{h}_4(\omega) := \bar{\sigma}_3 \otimes (\omega(\omega^2 + 3) \mathbb{1} + 2i(3\omega^2 + 1) \bar{\sigma}_3) = [\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbb{1}, \bar{h}_3(\omega)] \in \mathcal{S}_4\tag{3.23d}$$

となる。ここで $\bar{h}_1(\omega) \propto \bar{h}_3(\omega)$ を満たす ω では \bar{h}_3 と \bar{h}_4 が $\{\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbb{1}, \bar{H}_d(\omega)\}$ の深さ 2 までの交換子が張る空間内に含まれてしまう。これは $\omega = 0, \pm 1$ のときに起こる。 $\omega = 0$ では代数の次元が 3 でその基底は $\{\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbb{1}, \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_3, \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3\}$ となり、 $\omega = \pm 1$ では次元が 4 となりその基底は

$$\mathcal{B}_{\text{inv}}^\pm := \left\{ \bar{\sigma}_1 \otimes \frac{\mathbb{1} \pm Z}{2}, \bar{\sigma}_2 \otimes \frac{\mathbb{1} \pm Z}{2}, \bar{\sigma}_3 \otimes \frac{\mathbb{1} \pm Z}{2} \right\}\tag{3.24}$$

を用いて $\mathcal{B}_1 := \{\bar{\sigma}_1 \otimes (\mathbb{1} - Z)/2\} \cup \mathcal{B}_{\text{inv}}^+$ となる。 $\omega \neq 0, \pm 1$ の場合では次元が 6 となりその基底は $\mathcal{B} := \mathcal{B}_{\text{inv}}^- \cup \mathcal{B}_{\text{inv}}^+$ となる。 $\text{Span}(\mathcal{B}_{\text{inv}}^\pm)$ は $\text{Span}(\mathcal{B}_1)$ と $\text{Span}(\mathcal{B})$ の不変部分代数なので Theorem 2.2 の (1) を満たさないため一般に離散不定定数に対してもロバスト制御が実行できない。

しかし $\mathcal{B}_{\text{inv}}^{\pm}$ は互いに直交している, つまり任意の $\bar{b}_+ \in \mathcal{B}_{\text{inv}}^+$, $\bar{b}_- \in \mathcal{B}_{\text{inv}}^-$ に対して $[\bar{b}_+, \bar{b}_-] = 0$ となっているのでこれらは完全に独立している. そこで

$$\bar{B}_j^{\pm} := \bar{\sigma}_j \otimes \frac{\mathbb{1} \pm Z}{2} \in \mathcal{B}_{\text{inv}}^{\pm}, \quad (j = 1, 2, 3) \quad (3.25)$$

を用いて系のハミルトニアンを表現すると, $\bar{H}_d(\omega) = (\omega + 1)\bar{B}_3^+ + (\omega - 1)\bar{B}_3^-$, $\mathcal{S}_c = \{\bar{B}_1^+ + \bar{B}_1^-\}$ となり, 2つの独立したハミルトニアンの系

$$\begin{aligned} \bar{H}_1(\omega, t) &= (\omega + 1)\bar{B}_3^+ + u_1(t)\bar{B}_1^+, \\ \bar{H}_2(\omega, t) &= (\omega - 1)\bar{B}_3^- + u_1(t)\bar{B}_1^- \end{aligned} \quad (3.26)$$

に分解できる. この2つの系に対する制御性は同じ制御パルス $u_1(t)$ を用いた $\bar{H}_1(\omega, t)$ と $\bar{H}_2(\omega, t)$ のアンサンブル制御が可能かどうかの問題になっており, この系の制御性は Theorem 2.2 を用いて示すことができる. $\omega \neq \pm 1$ のときでは, それぞれのハミルトニアンが生成する代数 $\text{Lie}((\omega \pm 1)\bar{B}_3^{\pm}, \bar{B}_1^{\pm})$ (複号同順) が単純代数であるので Theorem 2.2 の (1) を満たす. また, $|\omega + 1| \neq |\omega - 1|$ のとき (つまり $\omega \neq 0$) は Theorem 2.2 の (2) も満たすため, この系は式 (3.23) で示したように $\mathcal{B}_{\text{inv}}^+ \cup \mathcal{B}_{\text{inv}}^-$ に属するハミルトニアンの制御が可能であることがわかる.

以上の議論では, ω が既知である場合を扱ってのだが, ここで2分割した不定定数 ω へのロバスト制御について考える. 例えば $\omega = 2$ または 4 のどちらかであるとした場合, 式 (3.26) で行ったようにそれぞれの ω について Example 3.8 の系を分解すると, $\bar{H}_1(2, t)$, $\bar{H}_1(4, t)$, $\bar{H}_2(2, t)$, $\bar{H}_2(4, t)$ を得る. この4つの単純代数を生成するハミルトニアン系に対するアンサンブル制御を考えることになるが, 式 (1.7) の X を用いて

$$\bar{B}_j^{\pm} = (\mathbb{1} \otimes X)\bar{B}_3^{\mp}(\mathbb{1} \otimes X) \quad (3.27)$$

(複合同順) となることから $\bar{H}_1(2, t) = 3\bar{B}_3^+ + u_1(t)\bar{B}_1^+$ と $\bar{H}_2(4, t) = 3\bar{B}_3^- + u_1(t)\bar{B}_1^-$ の系に関して Theorem 2.2 の (2) の条件を満たさず, 2値の離散不定定数 $\omega \in \{2, 4\}$ に対してロバスト制御が実現できない. 同様に任意の $\nu \in \mathbb{R}$ に対して $\omega = \nu, \nu + 2$ を持つ系は (2) を満たさず, 互いのダイナミクスの依存関係を消すことができないため, 原理的にロバスト制御することができないことがわかる. 従って Example 3.8 の系においてある不定定数を離散化した集合 Ω に対して, 任意の $\text{Span}(\mathcal{B}_{\text{inv}}^+ \cup \mathcal{B}_{\text{inv}}^-)$ の元がロバスト制御可能となるには Ω に $0, \pm 1$ を含まず, $\nu, \nu + 2 \in \Omega$ となる $\nu \in \mathbb{R}$ が存在しないように Ω を選ぶ必要があることが示せた.

次に, Example 3.8 の系における連続不定定数のロバスト制御性について解析する. このとき, 制御可能なハミルトニアンは Lemma 2.6 と交換子公式により

$$\bar{\sigma}_3 \otimes (\omega \mathbf{1} + Z) \quad \text{and} \quad \pm \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}, \quad (3.28a)$$

$$-\bar{\sigma}_3 \otimes (\omega \mathbf{1} + Z) \quad \text{and} \quad \pm \bar{\sigma}_2 \otimes (\omega \mathbf{1} + Z), \quad (3.28b)$$

$$\pm \bar{\sigma}_1 \otimes (\omega \mathbf{1} + Z)^2 \quad (3.28c)$$

となるため, 任意の $n \in \mathbb{N}$ に対して

$$\bar{\sigma}_3 \otimes (\omega \mathbf{1} + Z)^{2n+1}, \quad \bar{\sigma}_2 \otimes (\omega \mathbf{1} + Z)^{2n+1}, \quad \bar{\sigma}_1 \otimes (\omega \mathbf{1} + Z)^{2n} \quad (3.29)$$

が制御可能となることがわかる. 今, A と B が $[A, B] = 0$ を満たす行列であるとする, と

$$(A + B)^{2n+1} = \sum_{k=0}^{2n+1} \binom{2n+1}{k} A^k B^{2n+1-k} \quad (3.30)$$

となるので, $[\mathbf{1}, Z] = 0$ と $Z^2 = \mathbf{1}$ から

$$\begin{aligned} (\omega \mathbf{1} + Z)^{2n+1} &= \sum_{k=0}^{2n+1} \binom{2n+1}{k} (\omega \mathbf{1})^k Z^{2n+1-k} \\ &= \sum_{k=0}^n \binom{2n+1}{2k} \omega^{2k} Z + \sum_{k=0}^n \binom{2n+1}{2k+1} \omega^{2k+1} \mathbf{1} \\ &= f_Z^{(2n+1)}(\omega) Z + f_I^{(2n+1)}(\omega) \mathbf{1} \end{aligned} \quad (3.31)$$

となる. ここで

$$f_Z^{(2n+1)}(\omega) := \sum_{k=0}^n \binom{2n+1}{2k} \omega^{2k}, \quad f_I^{(2n+1)}(\omega) := \sum_{k=0}^n \binom{2n+1}{2k+1} \omega^{2k+1} \quad (3.32)$$

とした. また,

$$\begin{aligned} (\omega \mathbf{1} + \mathbf{1})^{2n+1} &= \sum_{k=0}^n \binom{2n+1}{2k} \omega^{2k} \mathbf{1} + \sum_{k=0}^n \binom{2n+1}{2k+1} \omega^{2k+1} \mathbf{1} \\ &= \left(f_Z^{(2n+1)}(\omega) + f_I^{(2n+1)}(\omega) \right) \mathbf{1} = (\omega + 1)^{2n+1} \mathbf{1}, \end{aligned} \quad (3.33a)$$

$$(\omega \mathbf{1} - \mathbf{1})^{2n+1} = \left(-f_Z^{(2n+1)}(\omega) + f_I^{(2n+1)}(\omega) \right) \mathbf{1} = (\omega - 1)^{2n+1} \mathbf{1} \quad (3.33b)$$

となることから,

$$f_Z^{(2n+1)}(\omega) = \frac{1}{2}((\omega + 1)^{2n+1} - (\omega - 1)^{2n+1}), \quad (3.34a)$$

$$f_I^{(2n+1)}(\omega) = \frac{1}{2}((\omega + 1)^{2n+1} + (\omega - 1)^{2n+1}) \quad (3.34b)$$

が得られる．従って，与えられた $N \in \mathbb{N}$ の下で，Trotter 公式から任意の $\bar{V} \in \{\bar{\sigma}_2, \bar{\sigma}_3\}$, $v_n \in \mathbb{R}$ ($n = 0, 1, \dots, N$) に対して

$$\begin{aligned} & \bar{V} \otimes \left[\sum_{n=0}^N v_n (\omega \mathbf{1} + Z)^{2n+1} \right] \\ &= \frac{\bar{V}}{2} \otimes \left[\sum_{n=0}^N v_n \left\{ f_I^{(2n+1)}(\omega) \mathbf{1} + f_Z^{(2n+1)}(\omega) Z \right\} \right] \\ &= \bar{V} \otimes \mathbf{1} \{f(\omega + 1) + f(\omega - 1)\} + \bar{V} \otimes Z \{f(\omega + 1) - f(\omega - 1)\}, \end{aligned} \quad (3.35)$$

が制御可能となる．ここで奇関数 $f(x) := \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N v_n x^{2n+1}$ を用いた．この系の $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に対するロバスト制御を行うには，任意の $\theta_0, \theta_1 \in \mathbb{R}$ に対して $f(\omega + 1) + f(\omega - 1) = \theta_0$ と $f(\omega + 1) - f(\omega - 1) = \theta_1$ を満たす，つまり $f(\omega + 1) = \theta_0 + \theta_1$ と $f(\omega - 1) = \theta_0 - \theta_1$ となっている必要がある．もし $\omega^{(f)} - \omega^{(i)} \geq 2$ となっているのであれば， $\nu, \nu + 2 \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ を満たす ν が存在するので， ν と $\nu + 2$ を含む系に対してのロバスト制御を実行するには， $f(\nu + 3) = f(\nu + 1) = \theta_0 + \theta_1$ と $f(\nu + 1) = f(\nu - 1) = \theta_0 - \theta_1$ が要求されるが，これは $\theta_0 + \theta_1 = \theta_0 - \theta_1$ となっているとき以外は満たすことができないので，全ての $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ の対する任意の $\text{Span}(\{\bar{B}_2^\pm, \bar{B}_3^\pm\})$ の元はロバスト制御できないことがわかる．また， $f(x)$ が奇関数であることから， $f(x)$ がゼロでない定数であるためには x がゼロを跨いではならないため $\omega^{(i)} - 1 > 0$ または $\omega^{(f)} + 1 < 0$ も満たす必要がある．これらをまとめると

$$\omega^{(f)} - \omega^{(i)} < 2, \quad (3.36a)$$

$$\omega^{(i)} > 1 \quad \text{or} \quad \omega^{(f)} < -1 \quad (3.36b)$$

を満たすとき $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に対して任意の $\text{Span}(\{\bar{B}_2^\pm, \bar{B}_3^\pm\})$ の元がロバスト制御可能である．

同様に， $\bar{\sigma}_1 \otimes Z$ の項を含むハミルトニアン¹の制御性は

$$\begin{aligned} (\omega \mathbf{1} + Z)^{2n} &= \sum_{k=0}^{2n} \binom{2n}{k} (\omega \mathbf{1})^k Z^{2n-k} \\ &= \sum_{k=0}^n \binom{2n}{2k} \omega^{2k} \mathbf{1} + \sum_{k=0}^{n-1} \binom{2n}{2k+1} \omega^{2k+1} Z \\ &= f_I^{(2n)}(\omega) \mathbf{1} + f_Z^{(2n)}(\omega) Z, \end{aligned} \quad (3.37)$$

となることと,

$$\begin{aligned} f_I^{(2n)}(\omega) &:= \sum_{k=0}^n \binom{2n}{2k} \omega^{2k} = \frac{1}{2} ((\omega+1)^{2n} + (\omega-1)^{2n}), \\ f_Z^{(2n)}(\omega) &:= \sum_{k=0}^{n-1} \binom{2n}{2k+1} \omega^{2k+1} = \frac{1}{2} ((\omega+1)^{2n} - (\omega-1)^{2n}) \end{aligned} \quad (3.38)$$

から, 与えられた $N \in \mathbb{N}$ の下で, 任意の $u_n \in \mathbb{R}$ ($n = 0, 1, \dots, N$) に対して

$$\begin{aligned} &\bar{\sigma}_1 \otimes \left[\sum_{n=0}^N u_n (\omega \mathbf{1} + Z)^{2n} \right] \\ &= \frac{\bar{\sigma}_1}{2} \otimes \left[\sum_{n=0}^N u_n \left\{ f_I^{(2n)}(\omega) \mathbf{1} + f_Z^{(2n)}(\omega) Z \right\} \right] \\ &= \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1} \{g(\omega+1) + g(\omega-1)\} + \bar{\sigma}_1 \otimes Z \{g(\omega+1) - g(\omega-1)\}, \end{aligned} \quad (3.39)$$

が制御可能であることがわかる. ここで $g(x) := \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N u_n x^{2n}$ とし, これは偶関数である. よって式 (3.36a) と

$$\omega^{(i)} > 0 \quad \text{or} \quad \omega^{(f)} < 0 \quad (3.40)$$

を満たすとき, $\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}$ と $\bar{\sigma}_1 \otimes Z$ が制御可能となる. 式 (3.40) の条件は不定定数 ω がゼロを含まないための条件である. $\omega = 0$ のときは $\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}$ のみ制御可能となる.

以上の結果をまとめると, 任意の $\omega^{(i)} < \omega^{(f)}$ について $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に対する $\text{Span}(\{\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}\})$ の制御は可能である. (制御パルスとしてデルタ関数を選ぶことにより明らか.) 式 (3.36a), (3.40) の条件を満たす場合は $\text{Span}(\{\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}, \bar{\sigma}_1 \otimes Z\})$ の元がロバスト制御可能である. また, 式 (3.36a), (3.36b) の条件を満たす場合は $\text{Span}(\mathcal{B}_{\text{inv}}^+ \cup \mathcal{B}_{\text{inv}}^-)$ の元がロバスト制御可能となる.

以上の結果により, 離散不定定数に対するロバスト制御と同様の性質を持っていることがわかり, 連続不定定数に関してもその値域 $[\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ が $\nu, \nu+2 \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ となるような ν が存在しなければロバスト制御が可能であることが確認された. このように Theorem 2.2 の (1) が満たされない場合でも, ロバスト制御が可能なが存在することがわかる.

最後に制御ハミルトニアンが2つある場合の系を考える.

Example 3.9 - 単純代数を生成しないハミルトニアン系 2 -

不定定数 $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ を含んだハミルトニアン

$$\begin{aligned}\bar{H}(t) &= \omega \bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1} + \bar{\sigma}_3 \otimes Z + u_1(t) \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1} + u_2(t) \bar{\sigma}_2 \otimes \mathbf{1}, \\ \bar{H}_d(\omega) &= \omega \bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1} + \bar{\sigma}_3 \otimes Z, \\ \mathcal{S}_c &= \{\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}, \bar{\sigma}_2 \otimes \mathbf{1}\}.\end{aligned}\tag{3.41}$$

を持つ量子系. ここで $-\infty < \omega^{(i)} < \omega^{(f)} < \infty$ であり, これらは既知の値とする.

Example 3.8 のときと同様に制御可能なハミルトニアンを求めると, 任意の $n \in \mathbb{N}$ に対して

$$\bar{\sigma}_1 \otimes (\omega I + Z)^n, \quad \bar{\sigma}_2 \otimes (\omega I + Z)^n, \quad \bar{\sigma}_3 \otimes (\omega I + Z)^n\tag{3.42}$$

となることが示せる. よって与えられた $N \in \mathbb{N}$ において, 任意の $\bar{V} \in \{\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, \bar{\sigma}_3\}$, $t_n \in \mathbb{R}$ ($n = 0, 1, \dots, N$) に対して

$$\begin{aligned}& \bar{V} \otimes \left[\sum_{n=0}^N t_n (\omega \mathbf{1} + Z)^n \right] \\ &= \frac{\bar{V}}{2} \otimes \left[\sum_{n=0}^N t_n \left\{ f_I^{(n)}(\omega) \mathbf{1} + f_Z^{(n)}(\omega) Z \right\} \right] \\ &= \bar{V} \otimes \mathbf{1} \{h(\omega + 1) + h(\omega - 1)\} + \bar{V} \otimes Z \{h(\omega + 1) - h(\omega - 1)\},\end{aligned}\tag{3.43}$$

が制御可能となる. ここで $h(x) := \sum_{n=0}^N t_n x^n$ と定義した. $h(x)$ に対しては任意の多項式を与えることができるので不定定数に対する制限は式 (3.36a) のみで与えられる. 従って任意の $\omega^{(i)} < \omega^{(f)}$ に対して $\text{Span}(\{\bar{\sigma}_1 \otimes I, \bar{\sigma}_2 \otimes \mathbf{1}, \bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}\})$ の元が制御可能となり, 式 (3.36a) を満たすときは $\text{Span}(\mathcal{B}_{\text{inv}}^+ \cup \mathcal{B}_{\text{inv}}^-)$ の元に対してロバスト制御が可能となる.

以上の結果より, 制御ハミルトニアンが2つある場合は, 制御性を持つ1量子ビットに関しては任意の有界不定定数領域に対して完全ロバスト制御可能であるが, 2量子ビット間の相互作用を持つハミルトニアンを制御したい場合は制御ハミルトニアンが1つである場合と同様に, 許される不定定数に制限 (3.36a) が加わることが示せた.

3.1.4 ロバスト制御に要する時間

前項までの議論では、原理的にロバスト制御が可能であるかについて多項式近似法による Lie 代数的なアプローチを用いて解析した。本項では、この解析的なアプローチに従った操作方法、つまり、Trotter 公式 (Lemma 2.1), 交換子公式 (Lemma 2.2), 量子回帰の法則 (Lemma 2.4) そして Lemma 2.6 に基づいた方法でハミルトニアンダイナミクスのロバスト制御を実行するためにかかる操作時間を見積もる。そのために以下の定義と 2 つの結果を用いる。

Definition 3.1 - ハミルトニアンのシミュレートにかかる時間 -

任意の $\varepsilon > 0$ に対して、あるハミルトニアン \bar{H} ($\|\bar{H}\| = \mathcal{O}(1)$) の t -時間発展 $e^{\bar{H}t}$ をシミュレートするのに必要な時間スケールを $\mathcal{T}_{\bar{H}}(t, \varepsilon)$ と定義する。

Definition 3.1 は、量子ダイナミクスの制御に時間 $\mathcal{O}(\mathcal{T}_{\bar{H}}(t, \varepsilon))$ を掛けることによって、

$$\|U - e^{\bar{H}t}\| < \varepsilon \quad (3.44)$$

を満たすユニタリ U が実行できることを意味する。例えば、与えられたハミルトニアンが \bar{H} であった場合は、 $\mathcal{T}_{\bar{H}}(t, \varepsilon) = t$ となる。ここで $t \gg \varepsilon$ とした。時間 t と許されるエラー ε が同スケールであれば、Theorem 2.3 などからもわかるように、全ての $\tau \in [0, t]$ に対して $\|\bar{H}(\tau)\| = \mathcal{O}(1)$ となっている量子ダイナミクスを制御するときにはほとんどすべての場合で目的としていた U の ε -エラー内に収まってしまう。そのため以下の議論では、特に断ることなく操作時間 t とその制御の精度 ε の関係は $t \gg \varepsilon$ となっていることを仮定する。このとき Trotter 公式と交換子公式を用いた場合の操作時間に関する以下 (Corollary 3.1, 3.2) の結果が得られる。証明は付録 B.3 で行う。

Corollary 3.1 - Trotter 分解を用いたハミルトニアンの操作時間 -

任意の $t > 0$ と $\varepsilon > 0$ に対して、 K 個のノルムが 1 のハミルトニアン $\{\bar{H}_k\}_{k=1}^K$ の t -時間発展の操作時間をそれぞれ $\mathcal{T}_{\bar{H}_k}(t, \varepsilon)$ とする。このとき、ある $\alpha_k \in \mathbb{R}$ ($k \in [K]$) を用いて $\bar{H} := \sum_k \alpha_k \bar{H}_k$ とし、Trotter 分解 (2.22) によって \bar{H} をシミュレートしようとする、

$$\mathcal{T}_{\bar{H}}(t, \varepsilon) = \frac{Kt^2}{\varepsilon} \max_{k \in [K]} \left\{ \mathcal{T}_{\bar{H}_k} \left(\frac{\varepsilon}{t}, \frac{\varepsilon^2}{t^2} \right) \right\} \quad (3.45)$$

となる. ここで全ての $k \in [K]$ に関して $\alpha_k = \mathcal{O}(1)$ とする. また $K = \mathcal{O}(1)$ のときは

$$\mathcal{T}_{\bar{H}}(t, \varepsilon) = \frac{t^2}{\varepsilon} \max_{k \in [K]} \left\{ \mathcal{T}_{\bar{H}_k} \left(\frac{\varepsilon}{t}, \frac{\varepsilon^2}{t^2} \right) \right\} \quad (3.46)$$

となる.

Corollary 3.1 の結果は, $\mathcal{T}_{\bar{H}_k}(t, \varepsilon) = t$ となっている場合には (\bar{H}_k のダイナミクスが直接制御可能な場合), $\mathcal{T}_{\bar{H}}(t, \varepsilon) = Kt$ のように ε 依存性が無いため, 精度を良くするための時間コストはかからないことを意味する.

交換子公式による制御と時間の関係も同様に得られる.

Corollary 3.2 - 交換子分解を用いたハミルトニアン の操作時間 -

任意の $t > 0$ と $\varepsilon > 0$ に対して, ノルムが 1 のハミルトニアン $\pm \bar{H}_1$ と $\pm \bar{H}_2$ の t -時間発展の操作時間をそれぞれ $\mathcal{T}_{\pm \bar{H}_k}(t, \varepsilon)$ とする. このとき交換子分解 (2.26) を用いて $\bar{H} := [\bar{H}_1, \bar{H}_2]$ をシミュレートしようとする

$$\mathcal{T}_{\bar{H}}(t, \varepsilon) = \frac{t^3}{\varepsilon^2} \max \left\{ \mathcal{T}_{\bar{G}} \left(\frac{\varepsilon}{t}, \frac{\varepsilon^3}{t^3} \right) \mid \bar{G} \in \{\pm \bar{H}_1, \pm \bar{H}_2\} \right\} \quad (3.47)$$

となる.

$k \in \{1, 2\}$ に対して $\mathcal{T}_{\pm \bar{H}_k}(t, \varepsilon) = t$ のときでは, $\mathcal{T}_{\bar{H}}(t, \varepsilon) = t^2/\varepsilon$ となるため, 精度を良くするために要する操作時間が大きくなることがわかる.

Corollary 3.1 と 3.2 を用いて Example 3.1 の系の不定定数 $\omega \in [1, 2]$ に対して CNOT ゲート (1.8) のロバスト制御にかかる時間を見積もる. CNOT ゲートを生成するハミルトニアンが $-\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1} - \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_1 + Z \otimes \bar{\sigma}_1$ であることに注意すると, その結果は表 3.1, 3.2 のようになる. 以下ではこの表について順に解説する.

表 3.1 の No. 1 のシミュレートは制御パルスとしてデルタ関数を選ぶことでゼロ時間で実現できる. No. 2 にある $\bar{H}_d(\omega)$ はドリフトハミルトニアンなので何もせずに実行でき, $-\bar{H}_d(\omega) + 2i\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3$ はドリフトハミルトニアンによるダイナミクスの実行前後に操作時間がゼロの量子操作 $Z \otimes \mathbf{1}$ を実行する (Lemma 2.6) ことによって制御できるため $\mathcal{O}(t)$ で実行可能となる. $i\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3$ のシミュレートは Trotter 公式 (Corollary 3.1) によって得られる. No. 3 では量子回帰の法則によるもので, $i\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3$ の回帰時間は 8π であることから得られる. No. 4 では $\bar{H}_{2,2} := -\bar{H}_d(\omega) + 2i\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3$ と $\bar{H}_3 = -i\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3$ の

No.	$\mathcal{T}_{\bar{H}}(t, \varepsilon)$	ハミルトニアン \bar{H}	方法
1	0	$\pm \bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}$	
2	$\mathcal{O}(t)$	$\bar{H}_d(\omega)$ $-\bar{H}_d(\omega) + 2i\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3$ $i\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3$	[L] [T]
3	$\mathcal{O}(8\pi - t)$	$-i\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3$	[R]
4	$\mathcal{O}\left(\frac{t^2}{\varepsilon}\right)$	$-\bar{H}_d(\omega)$	[T]
5	$\mathcal{O}\left(\frac{t^4}{\varepsilon^3}\right)$	$\pm i\omega \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_3$	[C]
6	$\mathcal{O}\left(\frac{t^8}{\varepsilon^7}\right)$	$\pm \omega \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}$ $\pm i(\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2 + \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3)$	[C] [T]
7	$\mathcal{O}\left(\frac{t^{16}}{\varepsilon^{15}}\right)$	$\pm \omega \bar{\sigma}_2 \otimes \mathbf{1}$ $\pm i(\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_2 - \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_1)$	[C] [C]
8	$\mathcal{O}\left(\frac{t^{32}}{\varepsilon^{31}}\right)$	$\pm \omega^2 \bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}$ $\pm (\mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_3 - \bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1})$ $\pm \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_3$	[C] [C] [T]
9	$\mathcal{O}\left(t \left(\frac{t}{\varepsilon}\right)^{2^6-1}\right)$	$\pm \omega^3 \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}$ $\pm \omega^3 \bar{\sigma}_2 \otimes \mathbf{1}$	[C] [C]
10	$\mathcal{O}\left(t \left(\frac{t}{\varepsilon}\right)^{2^{n+5}-1}\right)$	$\pm \omega^{2n+1} \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1} \quad (n = 1, 2, \dots)$ $\pm \omega^{2n+1} \bar{\sigma}_2 \otimes \mathbf{1} \quad (n = 1, 2, \dots)$	[C] [C]

表 3.1 ハミルトニアン \bar{H} をシミュレートするのにかかる時間 1 : 方法はハミルトニアン \bar{H} を制御が可能であることの根拠となる Lemma であり, [L] は Lemma 2.6, [R] は量子回帰の法則 (Lemma 2.4), [T] は Trotter 公式 (Lemma 2.1), [C] は交換子公式 (Lemma 2.2) を意味する.

Trotter 公式によって制御でき, $\max_{\bar{h} \in \{\bar{H}_{2,2}, \bar{H}_3\}} \{\mathcal{T}_{\bar{h}}(\varepsilon/t, (\varepsilon/t)^2)\} = \mathcal{O}(1)$ となることから得られる. No. 5 では $\pm i\omega \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_3 = [i\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3, \pm \bar{H}_d(\omega)]$ となることから, 交換子公式 (Corollary 3.2) によって得られる. No. 6 は $\pm \omega \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1} = 4[i\omega \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_3, \pm i\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3]$ よ

り交換子公式から得られ. Heisenberg 相互作用は Trotter 公式からわかる. 同様にして,

$$\pm\omega\bar{\sigma}_2 \otimes \mathbf{1} = [\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}, \pm\omega\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}], \quad (3.48a)$$

$$\pm i(\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_2 - \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_1) = [i(\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2 + \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3), \pm\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}], \quad (3.48b)$$

$$\pm\omega^2\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1} = [\omega\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}, \pm\omega\bar{\sigma}_2 \otimes \mathbf{1}], \quad (3.49a)$$

$$\pm(\mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_3 - \bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}) = 2[i(\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2 + \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3), \pm i(\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_2 - \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_1)], \quad (3.49b)$$

$$\pm\omega^3\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1} = [\omega\bar{\sigma}_2 \otimes \mathbf{1}, \pm\omega^2\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}], \quad (3.50a)$$

$$\pm\omega^3\bar{\sigma}_2 \otimes \mathbf{1} = [\omega\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}, \mp\omega^2\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}] \quad (3.50b)$$

となることから, 式 (3.48)-(3.50) より交換子公式を用いて No. 7-9 の制御性と操作時間が得られる. また, No. 10 は $n = 1$ のときは No.9 と一致するので正しく, $n > 1$ のときでも成り立つと仮定すると

$$\begin{aligned} \pm\omega^{2n+3}\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1} &= [\omega^{2n+1}\bar{\sigma}_2 \otimes \mathbf{1}, \pm\omega^2\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}], \\ \pm\omega^{2n+3}\bar{\sigma}_2 \otimes \mathbf{1} &= [\omega^{2n+1}\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}, \mp\omega^2\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1}] \end{aligned} \quad (3.51)$$

より, Corollary 3.2 から

$$\mathcal{T}_{\omega^{2n+3}\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}}(t, \varepsilon) = \frac{t^3}{\varepsilon^2} \times \frac{\varepsilon}{t} \left(\frac{\varepsilon/t}{(\varepsilon/t)^3} \right)^{2^{n+5}-1} = t \left(\frac{t}{\varepsilon} \right)^{2^{n+6}-1} \quad (3.52)$$

となるので, 帰納的に示せる. 次に, ω について高次の項を持つハミルトニアンを用いて多項式近似を行うことで表 3.2 の結果を得る. ここでは多項式近似を行うために, まず第一種 Chebyshev 多項式 $T_n(x)$ を用いて奇関数

$$f(x) = \begin{cases} -1 & (-1 \leq x \leq -\frac{1}{2}) \\ x(3 - 4x^2) & (-\frac{1}{2} < x < \frac{1}{2}) \\ 1 & (\frac{1}{2} \leq x \leq 1) \end{cases} \quad (3.53)$$

に近似, つまり $f_N(x) = \sum_{n=0}^N a_n T_n(x)$ を用いて, $\max_{x \in [-1, 1]} \{|f(x) - f_N(x)|\} \leq E_N$ となる $\{a_n\}_{n=0}^N \in \mathbb{R}^N$ と $N \in \mathbb{N}$ を求める. その結果, Chebyshev 多項式の奇数次では $n > 4$ で

$$a_n = -\frac{36}{\pi} \cdot \frac{\sin \frac{n}{3}\pi}{n(n^2 - 9)} \quad (n : \text{odd}) \quad (3.54)$$

となる．ここで n が偶数のときは $T_n(x)$ は偶関数なので $a_n = 0$ である．任意の $n \in \mathbb{N}_0$, $x \in [-1, 1]$ に対して $|T_n(x)| \leq 1$ となることから, $N > 4$ に対して

$$\begin{aligned} E_N &\leq \sum_{n=N+1}^{\infty} |a_n| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{36}{\pi} \cdot \frac{1}{n(n^2-9)} \\ &= \frac{6}{\pi} \cdot \frac{3N^4 - 6N^3 - 9N^2 + 12N + 4}{(N+2)(N+1)N(N-1)(N-2)(N-3)} \\ &= \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right) \end{aligned} \quad (3.55)$$

が得られる．よって, エラーを ε' 以下に抑えたい場合は $N = \mathcal{O}(\varepsilon'^{-\frac{1}{2}})$ 次の多項式

$$f_N(x/2) = \sum_{n=0}^N a_{2n-1} T_{2n-1}(x/2) = \sum_{n=0}^N b_n x^n \quad (3.56)$$

で近似することで, $\pm \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}$ が不定定数 $\omega \in [1, 2]$ に対してロバスト制御できる．

No.	$\mathcal{T}_{\bar{H}}(t, \varepsilon)$	ハミルトニアン \bar{H}	方法
11	$t \left(\frac{t}{\varepsilon}\right)^{2^{\mathcal{O}((t/\varepsilon)^{1/2})}}$	$\pm \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}$	[T] と [PA]
12	$t \left(\frac{t}{\varepsilon}\right)^{2^{\mathcal{O}(t/\varepsilon)}}$	$\pm \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_3$	[C]
13	$t \left(\frac{t}{\varepsilon}\right)^{2^{\mathcal{O}((t/\varepsilon)^2)}}$	$\pm(\mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_1 - \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1})$ $\pm \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_1$	[C] [T]
14	$t \left(\frac{t}{\varepsilon}\right)^{2^{\mathcal{O}((t/\varepsilon)^4)}}$	$\pm i \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_2$	[C]
15	$t \left(\frac{t}{\varepsilon}\right)^{2^{\mathcal{O}((t/\varepsilon)^8)}}$	$\pm i \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_1$ $-\bar{\sigma}_3 \otimes \mathbf{1} - \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_1 + Z \otimes \bar{\sigma}_1$	[C] [T]

表 3.2 ハミルトニアン \bar{H} をシミュレートするのにかかる時間 2 : 方法はハミルトニアン \bar{H} を制御が可能であることの根拠となる Lemma である．[PA] は多項式近似, [T] は Trotter 公式 (Lemma 2.1), [C] は交換子公式 (Lemma 2.2) を意味する．

実際に式 (3.56) のような不定定数を多項式化したハミルトニアンを制御するには, 不定定数に関して各次数を持つハミルトニアンを Trotter 公式を用いたこれらの線型和で記

述されるハミルトニアンの実行が必要となり、また ε の精度を得るには $N = \mathcal{O}((t/\varepsilon)^{\frac{1}{2}})$ 次が要求されるので Corollary 3.1 の式 (3.45) より

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}}(t, \varepsilon) &= \left(\frac{t}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{t^2}{\varepsilon} \max_{n \in [N]} \left\{ \mathcal{T}_{b_n \omega^n} \left(\frac{\varepsilon}{t}, \frac{\varepsilon^2}{t^2} \right) \right\} \\ &= t \left(\frac{t}{\varepsilon}\right)^{2^{\mathcal{O}((t/\varepsilon)^{-1/2})}} \end{aligned} \quad (3.57)$$

となることから、表 3.2 の No. 11 が得られる。No. 12-15 はそれぞれ

$$\pm i \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_3 = [i \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3, \pm \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}], \quad (3.58)$$

$$\pm (\mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_1 - \bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}) = 4[i(\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2 + \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3), \pm i \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_3], \quad (3.59)$$

$$\pm i \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_2 = [i \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3, \pm \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_1], \quad (3.60)$$

$$\pm i \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_1 = [i \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_2, \pm \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_3] \quad (3.61)$$

の関係から交換子公式と, Trotter 公式によって得られる。

上記の方法は Trotter と交換子公式などを用いた最適なシミュレート方式ではないが、表 3.2 から多項式近似を用いることで少なくとも No. 11 程度の操作時間が必要になることを予想することになる。この精度に対する時間依存性は、高い精度を要求すると実装が不可能となるようなスケールになりうるが、あとで確認するように Example 3.1 の系に対するロバスト制御パルスを数値計算で求めると操作時間はこのような依存性が見られないことがわかる。この傾向は通常の制御理論でも言えることであり [45–51]、交換子公式に従った制御方法は非常に非効率であることを示唆している。

3.2 ロバスト制御の数値解析

前節までは離散または連続値を取りうる不定定数に対してロバスト制御が原理的に可能であるかを Lie 代数的な方法を用いて解析的に求めてきた。しかし、解析的にロバスト制御が可能であるかが明らかにできていない系 (Example 3.6, 3.7) が存在することや、これまで用いてきた公式にに基づいてロバスト制御に必要な操作時間を解析的に見積もる (第 3.1.4 項) と非常に大きくなることが予想されているため、制御が実現できるかどうかも明らかになっていない。そこで数値解析を行うことで操作時間などの具体的な値を求め、さらに解析的な結果と比較することで、ロバスト制御が実験においても有用になるかを議論することができるようにする。

本節では 2 量子ビット系において解析的にロバスト制御が可能であると明らかにした系とその制御性が不明瞭な系に対してそれぞれ数値的にロバスト制御パルスが求められるかどうか解析する。また、本節ではハミルトニアンを歪エルミート表示ではなくエルミートで表現し、Pauli 行列も式 (1.7) の X, Y, Z を用いるとする。

3.2.1 GRAPE アルゴリズムによるロバスト制御パルスの探索

まず、2 量子ビットの Example 3.1 の系のロバスト制御パルスの存在性について第 2.3 節で示した GRAPE アルゴリズムと不定定数の離散化を用いて数値解析を行う。Example 3.1 の系では第 3.1 節で示したとおり、不定定数 $\omega \in [1, 2]$ に対してロバスト制御が可能であり、この不定定数に対するロバスト制御パルスを GRAPE アルゴリズムによって求めることが本項の内容である。また実行したい目的の量子ゲート U_{targ} を CNOT ゲート U_{CNOT} とする。このとき不定定数が ω であるとしたときの Example 3.1 の系を操作時間 T で制御された量子操作 $U_{\omega}(T)$ と目的の量子ゲート U_{targ} との差異 $\varepsilon(\omega)$ を評価関数

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{1}{d} \left| \text{Tr} \left(U_{\text{targ}}^{\dagger} U_{\omega}(T) \right) \right| \quad (3.62)$$

によって見積もるとする。ここで d は系の次元であり今の場合は 2 量子ビット系なので $d = 4$ となる。この評価関数を選択する理由は次の通りである。 $U_{\omega}(T)$ と U_{targ} の差異を行列ノルムで評価すると、量子力学において絶対位相に関しては影響を与えないことから

$$\varepsilon'(\omega) := \min_{\phi \in [0, 2\pi)} \|U_{\omega}(T) - e^{i\phi} U_{\text{targ}}\| \quad (3.63)$$

によって評価される．このときノルムのユニタリ不変性などを用いると，ノルムとして Frobenius ノルムを選ぶと $\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega)/d$ の関係を持つ．よって式 (3.62) によって評価したエラーの値は Frobenius ノルムによる $U_\omega(T)$ と U_{targ} の差異の評価と同じ意味を持つ．また任意の d 次元の行列 A に対して $\|A\|_\infty \leq \|A\|_2$ と $\|A\|_1 \leq \sqrt{d}\|A\|_2$ となる性質 [66] より，式 (3.62) で評価したエラーによって第 1.4 節で定義したどのノルムによる差異の評価法に対してもバウンドすることができる．

Example 3.1 のハミルトニアン

$$H(t) = \omega X \otimes \mathbf{1} + X \otimes X + Y \otimes Y + Z \otimes Z + u(t)Z \otimes \mathbf{1} \quad (3.64)$$

を持つ系^{*1}に対して操作時間 $T = 32$ とスロット数を 128 (第 2.3.1 項参照) とし，不定定数の値域 $[1, 2]$ を 11 分割した $\Omega_{11} = \{1.0, 1.1, \dots, 2.0\}$ に対してロバスト制御を実行する制御パルス $u(t)$ を GRAPE アルゴリズムを実装する QuTiP のパッケージ [75, 76] を用いて解析した．式 (2.41) で表される仮想的なハミルトニアン系を導入し，この系の各ブロック対角項が CNOT ゲートになるような制御パルスを求める．その結果を図 3.1 に示し，これを実現する制御パルスを図 3.2 に示す．図 3.1 の青線は，式 (3.62) によって見積もられる系の不定定数が $\omega \in [1, 2]$ (横軸) である場合にダイナミクスを制御することによって得られる量子操作 $U_\omega(T)$ と CNOT ゲートとの差異 (縦軸) を表す．また黒点は数値アルゴリズムによって最適化された点 $\omega \in \Omega_{11}$ のエラー $\varepsilon(\omega)$ を示している．この結果からわかるように，全ての領域 $[1, 2]$ に対してエラーは 10^{-4} 付近に収まっており，また全ての点でエラーが 10^{-3} 以下になっていることがわかる．また，図 3.2 から制御性を解析的に示す際には必要であった高強度 (デルタ関数的な) パルスも現れていないこともわかる．

同様の解析を，ロバスト制御が可能であるか解析的には不明瞭である Example 3.6

$$H(t) = X \otimes \mathbf{1} + \omega(X \otimes X + Y \otimes Y + Z \otimes Z) + u(t)Z \otimes \mathbf{1} \quad (3.65)$$

のハミルトニアン持つ系^{*2}についても行う．不定定数 $\omega \in [1, 2]$ を 11 分割に離散化した Ω_{11} に対するロバスト制御を実行する制御パルスを GRAPE アルゴリズムによって導く．また制御時間を 32，スロット数を 128，目的とする量子ゲートは Example 3.1 のときと

^{*1} 厳密には第 3.1.1 項で扱った Example 3.1 と係数が異なる．しかし，ロバスト制御に関しては本質的な違いはない

^{*2} ^{*1} と同様

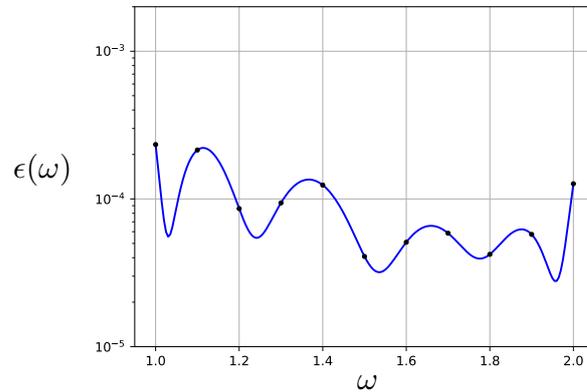


図 3.1 Example 3.1 の系 ($H(t) = \omega X \otimes \mathbf{1} + X \otimes X + Y \otimes Y + Z \otimes Z + u(t)Z \otimes \mathbf{1}$) の不定定数 $\omega \in [1, 2]$ に対する CNOT ゲートのロバスト制御. 不定定数を $\Omega_{11} = \{1.0, 1.1, \dots, 2.0\}$ のように離散化することによって GRAPE アルゴリズムを用いて制御パルス $u(t)$ を求める. 青線は式 (3.62) によって見積もられる不定定数 $\omega \in [1, 2]$ (横軸) をもつ系を制御することによって得られた量子操作と CNOT ゲートとの差異 (縦軸) を表す. 黒点は $\omega \in \Omega_{11}$ (アルゴリズムによって最適化された点) でのエラー $\varepsilon(\omega)$ を示している.

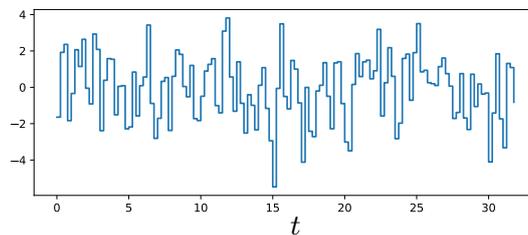


図 3.2 図 3.1 を得る制御パルス $u(t)$. 制御時間は 32 でありスロット数は 128 である. つまり, $u(t)$ は任意の $n \in [128]$ に対して $t \in [(n-1)T/128, nT/128]$ では定数となる.

同様に CNOT ゲートとし, その結果を図 3.3 に示す. 青線は図 3.1 と同様に不定定数 ω を持つ系によって生成された量子操作と CNOT ゲートとの差異である. 図 3.3 の結果からわかるようにすべての $\omega \in [1, 2]$ で 10^{-4} と 10^{-3} 付近の間に収まっており, CNOT ゲートのロバスト制御が実現している.

以上のように多項式近似によって原理的に連続不定定数に対してロバスト制御が可能であると示された系と, ロバスト制御性が不明瞭である系のどちらの場合でも連続不定定数を離散化することで, それらの系に対して GRAPE アルゴリズムを用いた制御パルスの最適化によって, ある領域の連続不定定数に対して最悪エラーが 10^{-3} が付近となる

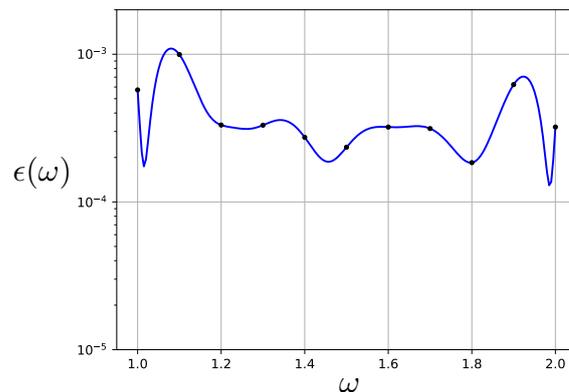


図 3.3 Example 3.6 の系 ($H(t) = X \otimes \mathbb{1} + \omega(X \otimes X + Y \otimes Y + Z \otimes Z) + u(t)Z \otimes \mathbb{1}$) の不定定数 $\omega \in [1, 2]$ に対する CNOT ゲートのロバスト制御. 不定定数を Ω_{11} で離散化することによって GRAPE アルゴリズムを用いて制御パルス $u(t)$ を求める. 青線は式 (3.62) によって見積もられる不定定数 $\omega \in [1, 2]$ (横軸) をもつ系を制御することによって得られた量子操作と CNOT ゲートとの差異 (縦軸) を表す. 黒点は $\omega \in \Omega_{11}$ (アルゴリズムによって最適化された点) でのエラー $\varepsilon(\omega)$ を示している.

ようなロバスト制御パルスを得ることができた.

ところで, 図 3.1, 3.3 を得るために制御パルスの探索をそれぞれ 100 回ずつ行った. GRAPE アルゴリズムによって制御パルスを得るためには, 始めに試行的な初期制御パルスを入力しその制御パルスを最適化していく. 得られる制御パルスの波形は初期値に依存するため, 初期制御パルスをランダムに選び, それぞれアルゴリズムを実行して得られた制御パルスのうち, 最も精度の高い制御パルスを選ぶことでより精度の良いロバスト制御パルスを得ることができる. 実際に図 3.1, 3.3 は複数回の試行の中で黒点 $\omega \in \Omega_{11}$ のエラーの平均値が最も良い結果となったものである. この場合, GRAPE アルゴリズムで最適化している 11 点 (黒点) 以外エラーがどうなるかについては保証されていないが, ほとんどの場合は 11 点のエラーの平均値が 100 回の試行の内で最小 (または 2 番目に小さい) となる制御パルスを用いた場合では, その他の点 $\omega \in [1, 2]$ でのエラーの最大値 $\max_{\omega \in [1, 2]} \{\varepsilon(\omega)\}$ も最小となる結果となった. これらの詳細のデータは付録 C.1 に載せておく.

3.2.2 ロバスト制御の最小操作時間の数値解析

第3.2.1項の結果によって連続不定定数を離散化し、その離散点に対するロバスト制御パルスを最適化する手法は連続値に対してもある程度有効であることがわかった。しかし、ロバスト制御の定義 (Definition 2.6) は任意の精度で実行できることが要請となっているので、この点に関しては明らかになっていない。

本項では連続不定定数の離散化数 N と離散化された点でのロバスト制御の許容エラー値 ϵ が与えられた際に、これらの条件を満たすロバスト制御を達成できる最小の操作時間 $T_{\min}(N, \epsilon)$ を数値解析によって求める。離散不定定数に対するロバスト制御は Theorem 2.2 の (1) と (2) の条件を満たすときには可能であることが保証されているため、原理的に $T_{\min}(N, \epsilon)$ が存在する。また第2.2.2項での解析により $T_{\min}(N, \epsilon) < \mathcal{O}(N)$ の場合、 $\lim_{N \rightarrow \infty} T_{\min}(N, \epsilon) < \infty$ となることがわかっているため、この条件を満たしている場合では最小操作時間の解析によって求める許容エラー値 ϵ を満たす連続不定定数に対するロバスト制御パルスが得られることが期待できる。

本項で扱う系は Theorem 2.2 の (1) と (2) の条件を満たす Example 2.8, 3.1, 3.6, 3.7 の4つの系とし、それぞれの系の情報は次の表3.3の通りであり、1量子ビットと2量子ビットについて連続不定定数に対するロバスト制御可能性が解析的に示される系とそうでない系がそれぞれ1つずつある。

系	ハミルトニアン	不定定数に対するロバスト制御性
Example 3.1	$\omega X \otimes \mathbb{1} + H_{\text{Hei}} + u(t)Z \otimes \mathbb{1}$	解析的に証明
Example 3.6	$X \otimes \mathbb{1} + \omega H_{\text{Hei}} + u(t)Z \otimes \mathbb{1}$	解析的には不明
Example 2.8	$X + \omega Y + u(t)Z$	解析的に証明
Example 3.7	$X + \omega Z + u(t)Z$	解析的には不明

表3.3 Example 2.8, 3.1, 3.6, 3.7の系に関する情報。 H_{Hei} は Heisenberg 相互作用 $X \otimes X + Y \otimes Y + Z \otimes Z$ とした。ここで実際に Example 3.1 と Example 3.6 で扱った系のハミルトニアンは $H_{\text{Hei}} \rightarrow H_{\text{Hei}}/2$ としたもので相互作用項の係数は異なるが、全く同様の方法でロバスト制御性を示すことができる。

始めに最小の操作時間を求めるために、与えられた条件下でロバスト制御が可能であるかを判断する手順を明記する。表3.3の系に対して、不定定数の値域が $[1, 2]$ であるとしたときに、離散化数 N 、許容エラー値 ϵ さらに試行操作時間 \hat{T} が与えられたときに以

下の Procedure 3.1 に従って、この試行操作時間 \hat{T} で各系の N -離散化不定定数に対するロバスト制御が可能であるか判断する。(この解析では QuTiP のパッケージを用いており、より詳しい設定条件は付録 C.2 に載せる.)

Procedure 3.1 - 与えられた条件の下でロバスト制御可能であるかの判断手順 -

1. 制御したい不定定数を含んだハミルトニアン $H(t)$ と目的の量子ゲート U_{targ} , 離散化数 N , 許容エラー値 ϵ , 試行操作時間 \hat{T} を与える. また式 (2.41) の不定定数が

$$\Omega_N := \left\{ 1 + \frac{n-1}{N-1} \mid n \in [N] \right\} \subset [1, 2] \quad (3.66)$$

である $H(t)$ に対する仮想ハミルトニアン $\mathbb{H}_N(t)$ を導入する.

2. 操作時間 \hat{T} に対してスロット数を 256 に設定し, 初期制御パルスをランダムに選び GRAPE アルゴリズムに従って仮想ハミルトニアンの系が $\mathbb{U}_N = \bigoplus_{n=1}^N U_{\text{targ}}$ を実行をするように最適化する作業を 100 回行う.
3. 前の操作で得れた制御パルスの中で, $\max_{\omega \in \Omega_N} \{\epsilon(\omega)\} \leq \epsilon$ を探す. ここで $\epsilon(\omega)$ は式 (3.62) で定義されるエラーである. 見つかった場合は操作時間 \hat{T} で ϵ の精度で全ての Ω_N に対して U_{targ} がロバスト制御可能と結論付ける. 見つからなかった場合は, 次のステップへ.
4. 2. で得られた 100 個の制御パルスの内の平均エラーが小さい順の上位 24 個を取り出す. 得られた 24 個の制御パルスそれぞれに対してスロット数を 256×2 とした (つまり各スロットを 2 分割する) ものを初期制御パルスに設定し, 2. と同様に \mathbb{U}_N を実行をするように最適化を行う.
5. 3. を実行する.
6. 4. と同様に, 今度は 4. で得られた平均エラーが小さい上位 12 個の制御パルスのスロット数を 256×4 にしたものを初期制御パルスとして設定し, 最適化を行う.
7. 3. を実行する.
8. 6. で得られた平均エラーが小さい上位 8 個の制御パルスのスロット数を 256×8 にしたものを初期制御パルスとして設定し, 最適化を行う.
9. 3. で示したエラーに対する条件を満たさなかった場合は操作時間 \hat{T} では与えられた条件の下でロバスト制御パルスは見つからないと結論付ける. 満たす場合は 3. と同様.

Procedure 3.1 を用いて, 目的の量子ゲート U_{targ} と離散化数 N , 許容エラー ϵ の

条件下で Procedure 3.2 に従って与えられたハミルトニアンに対する最小操作時間 $\hat{T}_{\min}(N, \varepsilon; U_{\text{targ}})$ を求める.

Procedure 3.2 - 最小操作時間の導出手順 -

1. 初期試行操作時間 $\hat{T}^{(i)}$ と操作時間精度 ΔT ($< \hat{T}^{(i)}$) を決める. また, $\hat{T}^{(i)} > (2^M - 1)\Delta T$ を満たす適当な $M \in \mathbb{N}$ を与え, 1ビットの値を持つ b を 0 に設定する.
2. 試行操作時間を $\hat{T} = \hat{T}^{(i)}$ とし, 与えられた条件の下で Procedure 3.1 を実行することでロバスト制御パルスが存在するかを判断する. 見つからなかった場合は, $\hat{T}_p := \hat{T}^{(i)} + 2^M \Delta T$ とする. 見つかった場合は $M \rightarrow M - 1$, $b = 1$ として, $\hat{T}_p := \hat{T}^{(i)} - 2^M \Delta T$ とする.
3. 試行操作時間 $\hat{T} = \hat{T}_p$ として Procedure 3.1 を実行し, ロバスト制御パルスが見つかった場合 $R = 1$ とし, 見つからなかった場合 $R = 0$ とする.
 - (a) $M = 0$ の場合.
 - $R = 1$ のとき, $\hat{T}_{\min}(N, \varepsilon; U_{\text{targ}}) = \hat{T}_p$ として終了する.
 - $R = 0$ のとき, $\hat{T}_{\min}(N, \varepsilon; U_{\text{targ}}) = \hat{T}_p + \Delta T$ として終了する.
 - (b) $M > 0$ の場合.
 - $R = 1$ のとき, $M \rightarrow M - 1$, $b = R$ として, $\hat{T}_p \rightarrow \hat{T}_p - 2^M \Delta T$ とする.
 - $R = 0, b = 1$ のとき, $M \rightarrow M - 1$ として, $\hat{T}_p \rightarrow \hat{T}_p + 2^M \Delta T$ とする.
 - $R = 0, b = 0$ のとき, $\hat{T}_p \rightarrow \hat{T}_p + 2^M \Delta T$ とする.
4. 3. に戻る.

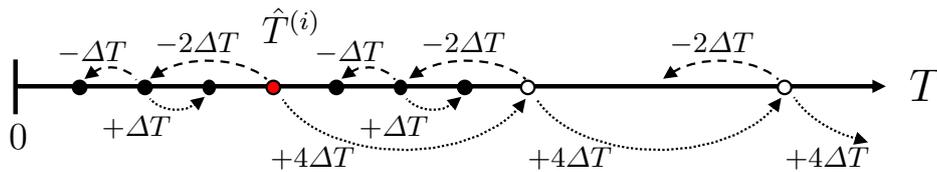


図 3.4 Procedure 3.2 の各ステップを表す図. ここで 1. で定義する M は 2 としている. 横軸は操作時間としており, 初期の試行操作時間 $\hat{T}^{(1)}$ を赤点で表している. そこから与えられた条件の下でロバスト制御パルスの有無によって次の試行操作時間 \hat{T}_p を決める. 点線は 3. で $R = 0$ であった場合, 破線は $R = 1$ であった場合の \hat{T}_p の移動を表している. 黒点は $b = 1$ のときを表しており, 白点は $b = 0$ を表している. $\hat{T}_p \rightarrow \hat{T}_p \pm \Delta T$ とした後にロバスト制御パルスの有無によって, $\hat{T}_{\min}(N, \varepsilon; T_{\text{targ}})$ が決まる.

Procedure 3.2 の概念図を図 3.4 に示す. 以上の Procedure 3.2 によって与えられた系と目的の量子ゲート U_{targ} , 離散化 N , 許容エラー ϵ の下での最小操作時間 $\hat{T}_{\min}(N, \epsilon; U_{\text{targ}})$ を解析できる. ここで数値計算の性質上, 得られた $\hat{T}_{\min}(N, \epsilon; U_{\text{targ}})$ は実際のロバスト制御可能となる最小操作時間 $T_{\min}(N, \epsilon; U_{\text{targ}})$ の上界となることに注意する. 表 3.3 の系に対してロバスト制御を実行するための最小操作時間 $\hat{T}_{\min}(N, \epsilon; U_{\text{targ}})$ を Procedure 3.2 を用いて求め, その結果を表 3.4-3.7 にまとめる.

各表では与えられた系と目的の量子操作の下で, Procedure 3.2 を用いた離散化数 N (横) と許容エラー ϵ (縦) に対する最小操作時間 $\hat{T}_{\min}(N, \epsilon; U_{\text{targ}})$ が載せてある.

$\epsilon \setminus N$	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10^{-3}	5	8	9	-	-	-	-	-	-
10^{-4}	5	8	10	11	13	-	-	-	-
5×10^{-5}	5	8	10	13	14	-	-	-	-
2×10^{-5}	5	8	10	14	14	15	16	-	-
10^{-5}	5	8	10	14	16	17	17	17	-

表 3.4 Example 3.1 の系で目的の量子ゲート U_{targ} を CNOT ゲート U_{CNOT} としたときの, 与えられた離散化数 N (横) と許容エラー ϵ (縦) に対するロバスト制御に要する最小操作時間 $\hat{T}_{\min}(N, \epsilon; U_{\text{CNOT}})$ を示す表. ここで $\Omega_1 := \{1\}$ とし, $\hat{T}_{\min}(N, \epsilon; U_{\text{CNOT}})$ を得るために Procedure 3.2 を使い, 各 $\hat{T}^{(i)}$ には適当な整数を選び, $\Delta T = 1$ とした. “-” の部分は解析していない点であり, 数字が太字の部分は与えた N 点のみではなく不定定数 $\omega \in [1, 2]$ のすべての点に対してロバストな制御パルスが見つかった場合を表す.

2量子ビット系を扱った表 3.4 と 3.5 では目的の量子ゲートとして CNOT ゲート (U_{CNOT}) を選び $\Delta T = 1$ とし, すべての Procedure 3.2 の初期試行操作時間 $\hat{T}^{(i)}$ を整数の中から選んだ. そのため \hat{T}_{\min} はすべて整数となる. このときそれぞれの系で許容エラーが 10^{-3} , 10^{-4} , 5×10^{-5} , 2×10^{-5} , 10^{-5} とした場合を扱い, 不定定数が $[1, 2]$ の領域全てに対するロバスト制御パルスが見つかるまで離散化数 $N = 1$ から増やしながらか最小操作時間 $\hat{T}_{\min}(N, \epsilon; U_{\text{CNOT}})$ を求めた. ここで $\Omega_1 = \{1\}$ とした.

Example 3.1 の系では解析的な結果から期待される通り, どの許容エラーに対しても N を増やしていくことによってすべての連続不定定数領域 $[1, 2]$ に対するロバスト制御パルスを見つけることができた. またそのときの操作時間を太字を使って表している. 同様に解析的な手法では連続不定定数に対するロバスト制御性が不明瞭である Example 3.6

$\epsilon \setminus N$	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10^{-3}	5	6	8	10	10	12	-	-	-
10^{-4}	5	6	9	11	13	14	15	-	17
5×10^{-5}	5	6	9	12	14	16	18	-	18
2×10^{-5}	5	6	9	12	15	17	21	21	22
10^{-5}	5	6	9	12	15	20	23	26	26
$\epsilon \setminus N$	10	11	12	13	14	15	16	17	18
10^{-3}	-	-	-	-	-	-	-	-	-
10^{-4}	-	17	-	-	-	-	-	-	-
5×10^{-5}	-	-	-	-	-	-	-	-	-
2×10^{-5}	-	-	-	-	-	-	-	-	-
10^{-5}	26	27	27	28	28	31	33	33	-

表 3.5 Example 3.6 の系で目的の量子ゲート U_{targ} を CNOT ゲートとしたのときの、与えられた離散化数 N (横) と許容エラー ϵ (縦) に対するロバスト制御に要する最小操作時間 $\hat{T}_{\min}(N, \epsilon; \text{CNOT})$ を示す表. 表 3.4 と同様に $\Omega_1 := \{1\}$ とし、 $\hat{T}_{\min}(N, \epsilon; \text{CNOT})$ を得るために Procedure 3.2 を用い、 $\Delta T = 1$ とした.

の系の場合でも、表 3.5 にあるように連続不定定数領域 $[1, 2]$ に対するロバスト制御パルスの存在が確認され、そのときの操作時間を太字で記述している. この数値解析の結果から Example 3.6 の系も連続不定定数に対するロバスト制御の実現可能性が高いことが示唆され、また少なくとも 10^{-5} の精度までは到達できることがわかった. そして、実現するロバスト制御パルスも数値計算によって得られた.

上記と同様の解析を 1 量子ビット系に対しても行う. 表 3.6, 3.7 では目的の量子ゲートとして NOT ゲート (X) を選び $\Delta T = 0.25$ とした. そして、すべての Procedure 3.2 の初期試行操作時間 $\hat{T}^{(i)}$ を整数の中から選び、許容エラーとして 10^{-3} , 10^{-4} , 10^{-5} , 10^{-6} の場合を扱った. 結果は 2 量子ビットのときと同様に連続不定定数に対するロバスト制御可能性を解析的に示せたかどうかに関わらず、どちらの場合も全領域に対するロバスト制御パルスを得ることができた. 表の太字の数値がそのときの操作時間に対応している.

以上の結果から、Theorem 2.2 にある条件 (1) と (2) は離散不定定数に対するロバスト制御性への条件となるだけでなく、連続不定定数に対するロバスト制御性も示しうることが推測される. 当然、本研究で得た数値解析の結果のみではこれらの推測の正しさ

$\epsilon \setminus N$	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10^{-3}	1.25	2	2.25	-	-	-	-	-	-
10^{-4}	1.25	2	2.75	-	-	-	-	-	-
10^{-5}	1.25	2	2.75	3.75	4	-	-	-	-
10^{-6}	1.25	2	3	4.25	4.5	4.75	4.75	5	-

表 3.6 Example 2.8 の系で目的の量子ゲート U_{targ} を NOT ゲート (X) としたのときの、与えられた離散化数 N (横) と許容エラー ϵ (縦) に対するロバスト制御に要する最小操作時間 $\hat{T}_{\min}(N, \epsilon; X)$ を示す表. $\hat{T}_{\min}(N, \epsilon; X)$ を得るために Procedure 3.2 を用い, $\Delta T = 0.25$ とした.

$\epsilon \setminus N$	1	2	3	4	5	6	7	8	9
10^{-3}	1.75	3.25	6	7.25	-	-	-	-	-
10^{-4}	1.75	3.5	6	7.5	9.5	9.5	9.5	9.5	9.5
10^{-5}	1.75	3.5	6.25	7.5	10	11.75	-	-	-
10^{-6}	1.75	3.5	6.25	7.5	10	11.75	14.5	14.5	14.5
$\epsilon \setminus N$	10	11	12	13	14	15	16	17	18
10^{-3}	-	-	-	-	-	-	-	-	-
10^{-4}	9.5	-	-	-	-	-	-	-	-
10^{-5}	-	-	-	-	-	-	-	-	-
10^{-6}	14.5	14.5	14.5	-	-	-	-	-	-

表 3.7 Example 3.7 の系で目的の量子ゲート U_{targ} を NOT ゲート (X) としたのときの、与えられた離散化数 N (横) と許容エラー ϵ (縦) に対するロバスト制御に要する最小操作時間 $\hat{T}_{\min}(N, \epsilon; X)$ を示す表. $\hat{T}_{\min}(N, \epsilon; X)$ を得るために Procedure 3.2 を用い, $\Delta T = 0.25$ とした.

を示すことはできないが、少なくとも今回の設定のもとでは連続不定定数に対するロバスト制御性が解析的に示された系とそうでない系との間には、どちらも制御パルスを見つけることができた点で違いがないことがわかった。今後はこの推測が正しいかどうかを解析的に明らかにすることが課題の一つとなる。唯一両者の間で違いが現れている点は、特に高精度を求める際に、不明瞭な系の方ではより大きな離散化数 N を用いて解析しなければ連続不定定数に対するロバスト制御性が得られなかった点である。 N を大きくすればそれだけ計算量は増えるため、解析的に連続不定定数に対するロバスト制御性

が示されていない Example 3.6, 3.7 の系の方が示されている系 Example 3.1, 2.8 より制御パルスを見つけることが困難である傾向が見られている。

最後に連続不定定数 ω に対するロバスト制御を行う時間コストと ω が既知である場合、つまり $N = 1$ のときにかかる時間コストの比を表 3.8 にまとめる。この結果からわかる通り、第 3.1.4 項で見積もったような長い操作時間がかかることがないことがわかり、おおよそ $\mathcal{O}(10)$ 程度でロバスト制御が可能であることを示唆している。また、表 3.8 の最後（2重線の下）の値は 3.1, 3.6 の系に対する目的の量子ゲートとして式 (1.8) で定義した T ゲートを用いた $\mathbb{1} \otimes T$ を選んだ場合の結果と、Example 2.8, 3.7 の系に対する目的の量子ゲートとして T ゲートを選んだ場合の結果を載せた。ここで、許容エラー値は 10^{-4} としている。CNOT や NOT ゲートの解析のみの結果では表 3.8 が示す比は 1,2 量子ビット系のどちらの場合でも解析的にロバスト制御可能性が示していない系の方が大きかったが、2 量子ビット系に関しては T ゲートを目的の量子操作とした場合は逆転している。一方で、1 量子ビット系に関しては差が大きく開く結果となっていることがわかる。このように、ロバスト制御に要する時間に関しては、一般的に制御性の証明が可能であるかどうかの違いが現れないことが予想される。

許容エラー \ 系	Example 3.1	Example 3.6	Example 2.8	Example 3.7
10^{-3}	1.80	2.40	1.80	4.14
10^{-4}	2.60	3.40	2.20	5.43
5×10^{-5}	2.80	3.60	-	-
2×10^{-5}	3.20	4.40	-	-
10^{-5}	3.40	6.60	3.20	6.71
10^{-6}	-	-	4.00	8.29
10^{-4}	2.60	2.00	1.00	38.00

表 3.8 Example 2.8, 3.1, 3.6, 3.7 の系それぞれの連続不定定数 $\omega \in [1, 2]$ に対するロバスト制御を実行するのに必要な最小操作時間 $\hat{T}_{\min}(\epsilon; U_{\text{CNOT}})$ と、不定定数が既知 ($\omega = 1$) である場合の最小操作時間 $\hat{T}_{\min}(1, \epsilon; U_{\text{CNOT}})$ との比 ($\hat{T}_{\min}(\epsilon; U_{\text{CNOT}})/\hat{T}_{\min}(1, \epsilon; U_{\text{CNOT}})$) を示す表。各系の $\hat{T}_{\min}(\epsilon; U_{\text{CNOT}})$ と $\hat{T}_{\min}(1, \epsilon; U_{\text{CNOT}})$ は表 3.4-3.7 のそれぞれ太字となっている操作時間と $N = 1$ のときの値を使って求めた。ここで小数点第 3 位を四捨五入しており、“-”は解析していない条件である。また、2重線の下最後の値は目的の量子ゲートとして 2 量子ビット系に対しては $\mathbb{1} \otimes T$ とし、1 量子ビット系に対しては T ゲートとした際の結果を示している。

第 4 章

ドリフトハミルトニアンを持たない d 次元系に対するロバスト制御

前章では系のドリフトハミルトニアンに不定定数が含まれる場合を扱い、ロバスト制御可能性を議論してきた。解析的な手法でロバスト制御の可能性を示すためにはドリフトハミルトニアンの反転、つまり逆時間発展の制御可能性を示すことが重要であり、これまでのところ反転が保証された例でロバスト制御が可能であることを示してきた。そこで本章では、ドリフトハミルトニアンを持たない、または制御ハミルトニアンのみ不定定数を持つ以下のより一般的な次元の系を考える。

Example 4.1 - d 次元で K 個の不定定数を持つ系 -

系の d 次元時間依存ハミルトニアン $\bar{H}(t)$ が

$$\bar{H}(t) := \sum_{k=1}^K u_k^{(u)}(t) \omega_k \bar{H}_k^{(u)} + \sum_{l=1}^L u_l(t) \bar{H}_l, \quad (4.1)$$

で与えられる。ここで系は $K \geq 1$ 個の不定定数 $\omega_k \in [\omega_k^{(i)}, \omega_k^{(f)}]$ ($k \in [K]$) を含み、 $\{\bar{H}_k^{(u)}\}_{k=1}^K$ と $\{\bar{H}_l\}_{l=1}^L$ は d 次元の跡がゼロの歪エルミート ($\mathfrak{su}(d)$) であるとする。また、 $\omega_k^{(i)}$ と $\omega_k^{(f)}$ は既知の値であるとし、 $u^{(u)}(t) \in \mathbb{R}^K$ と $u(t) \in \mathbb{R}^L$ は任意に選ぶことができる制御パルスである。

式 (4.1) のハミルトニアンを持つ系では $\{\pm \bar{H}_k^{(u)}\}_{k=1}^K$ と $\{\pm \bar{H}_l\}_{l=1}^L$ の制御性が自明に確認される。また、式 (4.1) のハミルトニアンに加えて不定定数を含まないドリフトハミルトニアン \bar{H}_d を持つ系も考えられるが、Trotter 公式や量子回帰の法則から $\text{Span}(\{\bar{H}_d\} \cup \{\pm \bar{H}_k^{(u)}\}_{k=1}^K \cup \{\pm \bar{H}_l\}_{l=1}^L)$ で表されるハミルトニアンを原理的に制御可能

であることから, \bar{H}_d を $\{\bar{H}_l\}_{l=1}^L$ に含めて考えることができるため省くことにする.

今, 不定定数を含んだ制御ハミルトニアンの集合 $S^{(u)} := \{\bar{H}_k^{(u)}\}_{k=1}^K$ と既知の制御ハミルトニアンの集合 $S_0 := \{\bar{H}_l\}_{l=1}^L$ について $\mathcal{L}_0 := \text{Lie}(S_0)$ と $\mathcal{L}_\infty := \text{Lie}(S^{(u)} \cup S_0)$ を定義し, また写像 $\mathcal{M}, \mathcal{M}_0 : \mathfrak{su}(d) \rightarrow \mathfrak{su}(d)$ を

$$\mathcal{M} := \{\text{ad}_{\bar{H}_1}^{n_1} \circ \text{ad}_{\bar{H}_2}^{n_2} \circ \cdots \circ \text{ad}_{\bar{H}_L}^{n_L} \mid n_1, n_2, \dots, n_L \in \mathbb{N}_0\} \quad (4.2)$$

$$\mathcal{M}_0 := \{\Gamma_1 \circ \Gamma_2 \circ \cdots \mid \Gamma_1, \Gamma_2, \dots \in \mathcal{M}\} \quad (4.3)$$

のように定義する. 定義から $\mathcal{L}_0 = \mathfrak{su}(d)$ のときは, その系は完全ロバスト制御可能である. また, \mathcal{L}_∞ は全ての不定定数 $\omega_k (\neq 0)$ が既知である場合で制御可能となるハミルトニアンを意味する. よってハミルトニアン (4.1) で与えられる系のロバスト制御性は \mathcal{L}_∞ 以下となることがわかる.

4.1 不定定数を1つ持つ系へのロバスト制御

始めに Example 4.1 の系のハミルトニアンのうち, 不定定数が1つのみ ($K = 1$) の場合を扱う.

Example 4.2 - d 次元で1つ不定定数を含む系 -

d 次元の時間依存ハミルトニアン $\bar{H}(t)$ が

$$\bar{H}(t) = u^{(u)}(t)\omega\bar{H}^{(u)} + \sum_{l=1}^L u_l(t)\bar{H}_l, \quad (4.4)$$

のように記述される. これは Example 4.1 の $K = 1$ とした系であり, $\bar{H}^{(u)} := \bar{H}_1^{(u)}$, $\omega := \omega_1$, $\omega^{(i)} := \omega_1^{(i)}$, $\omega^{(f)} := \omega_1^{(f)}$, $u^{(u)}(t) := u_1^{(u)}(t)$ とした.

Example 4.2 の系のロバスト制御を確認するために, $S_1 := \{\Gamma(\bar{H}^{(u)}) \mid \Gamma \in \mathcal{M}_0\}$ と $S_{n+1} := \{[\bar{x}, \bar{y}] \mid \bar{x} \in S_1, \bar{y} \in S_n\}$ を定義する. これは S_1 に対する S_1 から成る深さ n の交換子の集合である. このとき, 以下の定理が示される.

Theorem 4.1 - 不定定数が1つの場合の制御可能なハミルトニアン -

ある自然数 $N \in \mathbb{N}$ が与えられたとき, 式 (4.4) のハミルトニアンで与えられる系には任意の $\bar{H}^{(0)} \in \mathcal{L}_0$ と $\bar{H}^{(k)} \in \text{Span}(S_k)$, ($k \in [N]$) に対して

$$\sum_{n=0}^N \omega^n \bar{H}^{(n)} \quad (4.5)$$

が制御可能となる.

Theorem 4.1 の証明— 自明に制御が可能なハミルトニアンは $\pm\omega\bar{H}^{(u)}$ と $\{\pm\bar{H}_l\}_{l=1}^L$ であり, 従って \mathcal{L}_0 も制御が可能である. S_k は k 個の $\bar{H}^{(u)}$ を含んだ S_0 との多重交換子であるので, 任意の $\bar{h}^{(k)} \in S_k$ に対して交換子公式からすべての $\omega^k\bar{h}^{(k)}$ が制御可能となる. 更に Trotter 公式から式 (4.5) の制御性が確認される. \square

この結果を用いて Example 4.2 に対するロバスト制御性に関する以下の定理が示せる.

Theorem 4.2 - Example 4.2 の系のロバスト制御 -

Example 4.2 の系で $(\omega^{(i)}, \omega^{(f)}) \in \Omega_0$ で且つ, $\text{Span}(S_m) \subset \text{Span}(S_n)$ を満たす 2 つの正の整数 ($m < n$) が存在するとき, $\text{Lie}(S_0 \cup_{m'=0}^{m-1} S_{m+m'})$ のすべての元は不定定数 $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に対してロバスト制御可能である.

Theorem 4.2 の証明— まず, ある自然数 $k \in \mathbb{N}$ に対して写像の集合 \mathcal{M}_k を

$$\mathcal{M}_k := \{\text{ad}_{\bar{x}_1} \circ \text{ad}_{\bar{x}_2} \circ \cdots \circ \text{ad}_{\bar{x}_k} \mid \bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_k \in \text{Span}(S_1)\} \quad (4.6)$$

のように定義する. このとき定義から, 任意の $\bar{h}_m \in \text{Span}(S_m)$ と $\Gamma_k \in \mathcal{M}_k$ に対して $\Gamma_k(\bar{h}_m) \in \text{Span}(S_{m+k})$ となる.

Theorem 4.2 の仮定より, $\Delta := n - m$ とすると, 任意の $\bar{H} \in S_m$ に対して $\omega^m\bar{H}$ と $\omega^n\bar{H}$ は Theorem 4.1 より制御可能であり, また

$$\bar{H} = \sum_{j=1}^J \Gamma_{\Delta}^{\bar{H}, j}(\bar{h}_{\bar{H}}^{(1, j)}) \quad (4.7)$$

を満たす $J \in \mathbb{N}$ と $\bar{h}_{\bar{H}}^{(1, j)} \in \text{Span}(S_m)$, $\Gamma_{\Delta}^{\bar{H}, j} \in \mathcal{M}_{\Delta}$ が存在する. 全ての $j \in [J]$ に対して仮定より $\bar{h}_{\bar{H}}^{(1, j)} \in \text{Span}(S_{m+\Delta})$ が満たされることに注意すると, 式 (4.7) と Theorem 4.1 より $\omega^{m+2\Delta}\bar{H}$ も制御できることがわかる. $\bar{H} \in \text{Span}(S_m)$ は任意なので, $\text{Span}(S_m) \subset \text{Span}(S_{m+2\Delta})$ が得られる. 同様に任意の $\bar{H} \in \text{Span}(S_m)$ は $\bar{H} \in \text{Span}(S_{m+\Delta})$, $\bar{H} \in \text{Span}(S_{m+2\Delta})$ を満たすので $\text{Span}(S_m) \subset \text{Span}(S_{m+3\Delta})$ が得られる. 従ってこのような操作を続けることで, Theorem 4.1 から任意の $k \in \mathbb{N}_0$ に対して $\omega^{m+k\Delta}\bar{H}$ が制御できることがわかり, Trotter 公式から任意の実数 x に関する多項式関数 $f(x)$ を用いて $\omega^m f(\omega^{\Delta})\bar{H}$ が制御可能であることがわかる. $f(x)$ は x の値域が全て正または負であり, 有界であることが保証されている場合は, 任意の精度で x^{-m} に近似できるため, $\bar{H} \in \text{Span}(S_m)$ は不定定数 $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に対してロバスト制御可能となる. また仮定より $S_{m+1} \subset S_{n+1}$ も成り立つので, 任意の $k \in \mathbb{N}$ に対して

$S_{m+k} \subset S_{n+k}$ となる. 従って, すべての $K \in \mathbb{N}$ に対して $\text{Lie}(S_0 \cup_{k=0}^K S_{m+k})$ が制御可能となるが, $\text{Lie}(S_0 \cup S_k \cup S_l \cup S_{k+l}) \subset \text{Lie}(S_0 \cup S_k \cup S_l)$ となることから $K = m - 1$ まででこの系に対してロバスト制御が可能なハミルトニアンを得るには十分となる. \square

Theorem 4.2 から以下の結果も得られる.

Corollary 4.1 - $\bar{H}^{(u)}$ がロバスト制御できる場合 -

Example 4.2 の系で $(\omega^{(i)}, \omega^{(f)}) \in \Omega_0$ で且つ, $\bar{H}^{(u)} \in \text{Span}(S_n)$ を満たす $n \in \mathbb{N}$ が存在する場合, 任意の \mathcal{L}_∞ の元が不定定数 $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に対してロバスト制御可能である.

Corollary 4.1 の証明— Theorem 4.1 から $\omega^n \bar{H}^{(u)}$ が制御可能である. また, 任意の $\Gamma_0 \in \mathcal{M}_0$ に対して $\omega^n \Gamma_0(\bar{H}^{(u)}) \in S_1$ が制御可能となることから $S_1 \subset S_n$ が得られる. よって, Theorem 4.2 と $\mathcal{L}_\infty = \text{Lie}(S^{(u)} \cup S_n) = \text{Lie}(S_1 \cup S_n)$ となることから Corollary 4.1 が導かれる. \square

Example 4.3 - 1つの不定定数を含む3次元系 -

Example 4.2 の形で記述される系の中で, 特に

$$\bar{H}^{(u)} = i \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix}, \quad \bar{H}_1 = i \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

である量子系.

Example 4.3 の制御性— まず, $\mathcal{L}_\infty = \mathfrak{su}(3)$ となることが確認され, また $H^{(u)} \in S_1$ であることから, 以下の S_1 に属する4つの線型独立なハミルトニアン

$$\begin{aligned} \bar{H}_{1,1} &:= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \propto [\bar{H}_1, \bar{H}^{(u)}], & \bar{H}_{1,2} &:= i \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{bmatrix} \propto [\bar{H}_1, \bar{H}_{1,1}] \\ \bar{H}_{1,3} &:= \begin{bmatrix} 0 & 3 & 0 \\ -3 & 0 & -5 \\ 0 & 5 & 0 \end{bmatrix} \propto [\bar{H}_1, \bar{H}_{1,2}], & \bar{H}_{1,4} &:= i \begin{bmatrix} -3 & 0 & -4 \\ 0 & 8 & 0 \\ -4 & 0 & -5 \end{bmatrix} \propto [\bar{H}_1, \bar{H}_{1,3}] \end{aligned} \quad (4.9)$$

が得られる. $\bar{H}_{1,1} \dots \bar{H}_{1,4}$ は $[\bar{H}_1, \bar{H}_{1,4}] \in \text{Span}(\{\bar{H}^{(u)}, \bar{H}_{1,1}, \dots, \bar{H}_{1,4}\})$ となることか

ら $\text{Span}(S_1)$ を記述するのに十分である. 同様に S_2 に関しては

$$\begin{aligned} \bar{H}_{2,1} &:= i \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \propto [\bar{H}^{(u)}, \bar{H}_{1,1}], & \bar{H}_{2,2} &:= \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \propto [\bar{H}^{(u)}, \bar{H}_{1,2}], \\ \bar{H}_{2,3} &:= i \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 4 \\ 0 & 4 & 0 \end{bmatrix} \propto [\bar{H}_{1,1}, \bar{H}_{1,2}], \end{aligned} \quad (4.10)$$

の3つで $S_2 = \text{Span}(\{\bar{H}_{2,1}, \bar{H}_{2,2}, \bar{H}_{2,3}\})$ であることから, $\bar{H}_{2,1}, \bar{H}_{2,2}, \bar{H}_{2,3}$ が S_2 を記述するのに十分であることがわかる. S_3 も以下の6つのハミルトニアン

$$\begin{aligned} \bar{H}_{3,1} &:= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \propto [\bar{H}^{(u)}, \bar{H}_{2,1}], & \bar{H}_{3,2} &:= i \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \propto [\bar{H}^{(u)}, \bar{H}_{2,2}], \\ \bar{H}_{3,3} &:= i \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \propto [\bar{H}_{1,1}, \bar{H}_{2,1}], & \bar{H}_{3,4} &:= \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \propto [\bar{H}_{1,1}, \bar{H}_{2,2}], \\ \bar{H}_{3,5} &:= i \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix} \propto [\bar{H}_{1,2}, \bar{H}_{2,2}], & \bar{H}_{3,6} &:= \begin{bmatrix} 0 & 27 & 0 \\ -27 & 0 & -56 \\ 0 & 56 & 0 \end{bmatrix} \propto [\bar{H}_{1,4}, \bar{H}_{2,3}]. \end{aligned} \quad (4.11)$$

によって記述される ($S_3 = \text{Span}(\{\bar{H}_{3,1}, \dots, \bar{H}_{3,6}\})$) ことが確認できる. 今, $\bar{H}^{(u)} = -\bar{H}_{3,2} + \bar{H}_{3,3} + \bar{H}_{3,5} \in \text{Span}(S_3)$ となるので, $(\omega^{(i)}, \omega^{(f)}) \in \Omega_0$ であるとき, Corollary 4.1 から Example 4.3 の系は任意の \mathcal{L}_∞ の元が $\omega \in [\omega^{(i)}, \omega^{(f)}]$ に対してロバスト制御可能であることがわかる. また $\mathcal{L}_\infty = \mathfrak{su}(3)$ なので, この系は完全ロバスト制御可能である.

以上のように, 3次元の量子系に対してもドリフトハミルトニアンが存在しないとき (または反転が実行できる), 完全ロバスト制御が可能となる場合が存在することが確認された.

4.2 不定定数を複数持つ系へのロバスト制御

本節では最初に導入した Example 4.1 の系について考える．まず，任意の $k \in [K]$ に対して $S_{1,k} := \{\Gamma(\bar{H}_k^{(u)}) \mid \Gamma \in \mathcal{M}_0\}$ と $S_{n+1,k} := \{[\bar{x}, \bar{y}] \mid \bar{x} \in S_{1,k}, \bar{y} \in S_{n,k}\}$ を定義する． $S_{n,k}$ は前章で定義した S_n を複数の不定定数に対応するために拡張して定義した．これらを用いて以下の結果が得られる．

Corollary 4.2 - Example 4.1 の系のロバスト制御 -

Example 4.1 の系について，ある $k \in [K]$ に対して $(\omega_k^{(i)}, \omega_k^{(f)}) \in \Omega_0$ であり， $\text{Span}(S_{m,k}) \subset \text{Span}(S_{n,k})$ を満たす 2 つの正の整数 m, n ($m < n$) が存在するとする．このときすべての $\text{Lie}(S_0 \cup_{m'=0}^{m-1} S_{m+m',k})$ の元が $\omega_k \in [\omega_k^{(i)}, \omega_k^{(f)}]$ に対してロバスト制御が可能となる．

Corollary 4.2 は Theorem 4.2 の複数不定定数を持つ系への自明な一般化であり，すべての $k' \neq k$ に対して $u_{k'}^{(u)}(t) = 0$ することで示すことができる．Corollary 4.2 から以下の Example 4.4 の系のロバスト制御性を示すことができる．

Example 4.4 - 2 個の不定定数を持つ 5 次元の系 -

Example 4.1 の系において，特に $K = 2, L = 1$ の場合であり，

$$\begin{aligned} \bar{H}_1^{(u)} &= \begin{bmatrix} 2i & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2i \end{bmatrix}, & \bar{H}_2^{(u)} &= \begin{bmatrix} 0 & i & 0 & 0 & i \\ i & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \\ & & \bar{H}_1 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{4.12}$$

を持つ量子系．また，すべての $k = 1, 2$ に対して $(\omega_k^{(i)}, \omega_k^{(f)}) \in \Omega_0$ を満たすとする．

Example 4.4 の制御性— この系は $\mathcal{L}_\infty = \mathfrak{su}(5)$ となることが確認され、また $\bar{H}_1^{(u)} \in S_{1,1}$ であり、

$$\begin{aligned} \bar{H}_{1,1} &:= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \propto [\bar{H}_1, \bar{H}_1^{(u)}], \\ \bar{H}_{2,1} &:= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \propto [\bar{H}_1, \bar{H}_{1,1}] \end{aligned} \quad (4.13)$$

が $S_{1,1}$ に属し、 $\text{Span}(S_{1,1}) = \text{Span}(\{\bar{H}_1^{(u)}, \bar{H}_{1,1}, \bar{H}_{2,1}\})$ となる。同様に $S_{2,1} = S_{4,1} = \text{Span}(\{\bar{H}_1\})$ であることが確認でき、従って Corollary 4.2 から任意の $\text{Lie}(S_0 \cup S_{2,1} \cup S_{3,1}) = \text{Lie}(S_0, S_{1,1}) (\subsetneq \mathfrak{su}(5))$ の元が $\omega_1 \in [\omega_1^{(i)}, \omega_1^{(f)}]$ に対してロバスト制御可能となる。また、 $S_{1,2}$ の元は $\bar{H}_2^{(u)}$ と

$$\bar{H}_{1,2} := \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \propto [\bar{H}_1, \bar{H}_2^{(u)}], \quad \bar{H}_{2,2} := \begin{bmatrix} 0 & i & 0 & i & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \propto [\bar{H}_1, \bar{H}_{1,2}] \quad (4.14)$$

で記述される。つまり $\text{Span}(S_{1,2}) = \text{Span}(\{\bar{H}_2^{(u)}, \bar{H}_{1,2}, \bar{H}_{2,2}\})$ となっている。同様に

$$\begin{aligned} \bar{H}_{3,2} &:= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 & 0 \end{bmatrix} \propto [\bar{H}_2^{(u)}, \bar{H}_{1,2}], \\ \bar{H}_{4,2} &:= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \propto [\bar{H}_2^{(u)}, \bar{H}_{2,2}], \\ \bar{H}_1 &= [\bar{H}_{1,2}, \bar{H}_{2,2}] \end{aligned} \quad (4.15)$$

を用いて $\text{Span}(S_{2,2}) = \text{Span}(\{\bar{H}_1, \bar{H}_{3,2}, \bar{H}_{4,2}\})$ となることが確認できる。同様にして $S_{3,2}$ を求めると、 $\text{Span}(S_{3,2}) = \text{Span}(S_{1,2}) = \text{Span}(\{\bar{H}_2^{(u)}, \bar{H}_{1,2}, \bar{H}_{2,2}\})$ となることが

示せる. 従って, $H_2^{(u)} \in \text{Span}(S_{3,2})$ であることから Corollary 4.2 と Corollary 4.1 の結果を用いて, 任意の $\text{Lie}(S_0 \cup \{H_2^{(u)}\}) (\subsetneq \mathfrak{su}(5))$ の元が $\omega_2 \in [\omega_2^{(i)}, \omega_2^{(f)}]$ に対してロバスト制御可能となる. これらのロバスト制御性を合わせれば, 結果として Example 4.4 の系は $\mathfrak{su}(5) = \text{Lie}(S_0 \cup S_{2,1} \cup S_{3,1} \cup \{H_2^{(u)}\})$ であることから, 2つの不定定数 $\omega_1 \in [\omega_1^{(i)}, \omega_1^{(f)}]$, $\omega_2 \in [\omega_2^{(i)}, \omega_2^{(f)}]$ に対して完全ロバスト制御可能であることがわかる.

Corollary 4.2 は2つの異なる不定定数を独立に考えた Theorem 4.2 の自明な一般化であるが, 当然 $S^{(u)}$ に属する元の間による多重交換子も考慮することができ, 実際にこの効果によってロバスト制御可能性を拡張しうる. しかし, Corollary 4.2 では既知の制御ハミルトニアンを持たない系 ($\mathcal{L}_0 = \{0\}$) に関してはロバスト制御性を示すことができない. 以上のような系に対処するために, $\mathbf{n} \in \mathbb{N}_0^K$ に対してハミルトニアンの集合 $\mathcal{S}_{\mathbf{n}}$ を任意の $\bar{H} \in \mathcal{S}_{\mathbf{n}}$ に対して $(\prod_{k=1}^K \omega_k^{n_k}) \bar{H}$ が制御可能となるように定義する. この定義から, $\mathcal{L}_0 \subset \mathcal{S}_{\mathbf{0}_K}$ を満たし, $\mathcal{S}_{\mathbf{0}_K}$ は Example 4.1 の系に対するロバスト制御可能なハミルトニアンの集合であり, 従って $\mathcal{S}_{\mathbf{0}_K} = \text{Lie}(\mathcal{S}_{\mathbf{0}_K})$ を満たす. ここで $\mathbf{0}_K$ は K 次元のゼロベクトルである. さらに関数 $\nu_K : \mathbb{N} \times [K] \rightarrow \mathbb{N}_0^K$ が

$$\nu_K(m, k) = \underbrace{(0, \dots, 0)}_{k-1}, m, \underbrace{(0, \dots, 0)}_{K-k}. \quad (4.16)$$

を満たすように定義すると, これを用いて $\mathcal{S}_{m,k} \subset \mathcal{S}_{\nu_K(m,k)}$ が得られる. よって, 以上の定義を用いて Theorem 4.1 と同様の方法で Corollary 4.3 が得られる.

Corollary 4.3 任意の $\mathbf{m}, \mathbf{n} \in \mathbb{N}_0^K$ に対して, $\{[\bar{g}, \bar{h}] \mid \bar{g} \in \mathcal{S}_{\mathbf{m}}, \bar{h} \in \mathcal{S}_{\mathbf{n}}\} \subset \mathcal{S}_{\mathbf{m}+\mathbf{n}}$.

ここから $\mathcal{L}_0 = \{0\}$ の場合などでも扱うことができる Theorem 4.3 を示す. 今, \mathcal{C}_n を自然数 n のコンポジション (composition) [86] の集合とする. n のコンポジションとは総和が n となる自然数の数列であり, 順序のみが異なる2つの n のコンポジションは異なるものとみなされる. また任意のコンポジション $c \in \mathcal{C}_n$ に対して, $|c|$ と $c(i)$ はそれぞれ c の大きさ (要素の数) と c の i 番目の要素を意味するとする. このとき以下の定理を示すことができる.

Theorem 4.3 - 複数の不定定数を持つ系に対するロバスト制御 -

Example 4.1 の系について, ある非負の整数列を $\mathbf{n} \in \mathbb{N}_0^K$ とする. このとき, $s \subset \mathcal{S}_{\mathbf{n}}$, $k \in [K]$ と $m \in \mathbb{N}$ が, すべての $\bar{g} \in s$ に対して,

$$\bar{g} = \text{ad}_{\bar{H}_1} \circ \text{ad}_{\bar{H}_2} \circ \dots \circ \text{ad}_{\bar{H}_{|c_{\bar{g}}|}}(\bar{h}_{\bar{g}}) \quad (4.17)$$

となる $\bar{h}_{\bar{g}} \in s$ とコンポジション $c_{\bar{g}} \in \mathcal{C}_m$ が存在すると仮定する. ここで $\bar{H}_i \in \mathcal{S}_{\nu_K(c_{\bar{g}}(i),k)}$, ($i \in [|c_{\bar{g}}|]$) とした. このとき, もし $(\omega_k^{(i)}, \omega_k^{(f)}) \in \Omega_0$ ならば

$$\text{Span}(\{\bar{g} \mid \bar{g} \in s\} \cup \{\text{ad}_{\bar{H}}(\bar{g}) \mid \bar{g} \in s, \bar{H} \in \cup_{m'=0} \mathcal{S}_{\nu(m',k)}\}) \subset \mathcal{S}_{\mathbf{n}^{(\hat{k})}} \quad (4.18)$$

となる. ここで $\mathbf{n}^{(\hat{k})} \in \mathbb{N}_0^K$ はこの k 番目の要素がゼロであり, それ以外は \mathbf{n} と同じベクトルである.

Theorem 4.3 の証明— Theorem 4.3 の仮定より, 任意の $\bar{g} \in s$ に対して式 (4.17) で定義される $\bar{h}_{\bar{g}} \in s$ が存在し, 同様に $\bar{h}_{\bar{g}} = \text{ad}_{\bar{H}_1^{(1)}} \circ \text{ad}_{\bar{H}_2^{(1)}} \circ \cdots \circ \text{ad}_{\bar{H}_{|c_{\bar{g}}^{(1)}|}^{(1)}}(\bar{h}_{\bar{g}}^{(1)})$ を満たす $\bar{h}_{\bar{g}}^{(1)} \in s$ とコンポジション $c_{\bar{g}}^{(1)} \in \mathcal{C}_m$ が存在する. ここで $\bar{H}_i^{(1)} \in \mathcal{S}_{\nu_K(c_{\bar{g}}^{(1)}(i),k)}$, ($i \in [|c_{\bar{g}}^{(1)}|]$) である. 従って, $l \in \mathbb{N}$ に対する漸化式 $\bar{h}_{\bar{g}}^{(l)} = \text{ad}_{\bar{H}_1^{(l+1)}} \circ \text{ad}_{\bar{H}_2^{(l+1)}} \circ \cdots \circ \text{ad}_{\bar{H}_{|c_{\bar{g}}^{(l+1)}|}^{(l+1)}}(\bar{h}_{\bar{g}}^{(l+1)})$ によって定義される $\bar{h}_{\bar{g}}^{(l+1)} \in s$ とコンポジション $c_{\bar{g}}^{(l+1)} \in \mathcal{C}_m$ が存在することがわかる. ここで $\bar{H}_i^{(l+1)} \in \mathcal{S}_{\nu_K(c_{\bar{g}}^{(l+1)}(i),k)}$, ($i \in [|c_{\bar{g}}^{(l+1)}|]$) である. これにより

$$\bar{g} \in \mathcal{S}_{\mathbf{n} + \nu_K(lm, k)} \quad (4.19)$$

となること, 及び任意の x に関する多項式 $f(x)$ に対して $\bar{g}f(\omega_k^m) \prod_{k'=1}^K \omega_{k'}^{n_{k'}}$ が Trotter 公式から制御可能であることがわかる. $R \subset (0, +\infty)$ または $R \subset (-\infty, 0)$ を満たす領域 R に関して, すべての $x \in R$ に対して $f(x)$ は任意の精度で $f(x)$ を x^{-n_k} に近似することができ, 従って $\text{Span}(\{g \mid g \in s\}) \subset \mathcal{S}_{\mathbf{n}^{(\hat{k})}}$ が得られる. 同様に, ある $m' \in \mathbb{N}_0$ に対して任意の $\bar{H} \in \mathcal{S}_{\nu_K(m',k)}$ は式 (4.19) より $[\bar{H}, \bar{g}] \in \mathcal{S}_{\mathbf{n} + \nu_K(m'+lm, k)}$ を満たし, $x^{-n_k - m'}$ に対する多項式近似を施すことで式 (4.18) が得られる. \square

Theorem 4.3 を用いて Example 4.5 で与えられるような完全既知ハミルトニアンが制御できない系に対してもロバスト制御が可能であることを示せる.

Example 4.5 - $\mathcal{L}_0 = \{0\}$ である系 -

Example 4.1 の系において, $K = 2$, $L = 0$ であるとし, ハミルトニアン

$$\begin{aligned} \bar{H}(t) &= u_1^{(u)}(t)\omega_1\bar{H}_1^{(u)} + u_2^{(u)}(t)\omega_2\bar{H}_2^{(u)} \\ \bar{H}_1^{(u)} &= \begin{bmatrix} i & 0 & 0 \\ 0 & 2i & 0 \\ 0 & 0 & -3i \end{bmatrix}, \quad \bar{H}_2^{(u)} = \begin{bmatrix} 0 & i & 0 \\ i & 0 & i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (4.20)$$

を持つ量子系. また, すべての $k = 1, 2$ に対して $(\omega_k^{(i)}, \omega_k^{(f)}) \in \Omega_0$ を満たすとする.

Example 4.5 の制御性— Example 4.5 の系では $\mathcal{L}_\infty = \mathfrak{su}(3)$ となり, また $\bar{H}_1^{(u)} \in \mathcal{S}_{(1,0)}$ と $\bar{H}_2^{(u)} \in \mathcal{S}_{(0,1)}$ であることから, Corollary 4.3 より

$$\begin{aligned}
 \bar{H}_{(1,1)} &:= \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 5 \\ 0 & -5 & 0 \end{bmatrix} \propto [\bar{H}_2^{(u)}, \bar{H}_1^{(u)}] \in \mathcal{S}_{(1,1)}, \\
 \bar{H}_{(1,2)} &:= \begin{bmatrix} i & 0 & 3i \\ 0 & -6i & 0 \\ 3i & 0 & 5i \end{bmatrix} \propto [\bar{H}_2^{(u)}, \bar{H}_{(1,1)}] \in \mathcal{S}_{(1,2)}, \\
 \bar{H}_{(2,1)} &:= \begin{bmatrix} 0 & i & 0 \\ i & 0 & 25i \\ 0 & 25i & 0 \end{bmatrix} \propto [\bar{H}_1^{(u)}, \bar{H}_{(1,1)}] \in \mathcal{S}_{(2,1)}, \\
 H_{(2,2)} &:= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \propto [\bar{H}_1^{(u)}, \bar{H}_{(1,2)}] \propto [\bar{H}_2^{(u)}, \bar{H}_{(2,1)}] \in \mathcal{S}_{(2,2)}, \\
 \bar{H}_{(2,3)} &:= \begin{bmatrix} 0 & i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & -i & 0 \end{bmatrix} \propto [\bar{H}_2^{(u)}, \bar{H}_{(2,2)}] \in \mathcal{S}_{(2,3)}, \\
 \bar{H}_{(2,4)} &:= \bar{H}_{(2,2)} \propto [\bar{H}_2^{(u)}, \bar{H}_{(2,3)}] \in \mathcal{S}_{(2,4)}
 \end{aligned} \tag{4.21}$$

が得られる. 式 (4.21) より $\bar{H}_{(2,4)} = \bar{H}_{(2,2)} = [\bar{H}_2^{(u)}, [\bar{H}_2^{(u)}, \bar{H}_{(2,2)}]] \in \mathcal{S}_{(2,4)}$ が確認され, Theorem 4.3 の s を $\text{Span}(\{H_{(2,2)}\})$ とすることによって $\text{Span}(\bar{H}_{(2,2)}, \bar{H}_{(2,3)}) \subset \mathcal{S}_{(2,0)}$ となることがわかる. 同様に

$$H_{(2,3)} \propto [H_{(2,2)}, [H_{(2,3)}, H_{(2,2)}]] \in \mathcal{S}_{(6,0)}, \tag{4.22}$$

$$H_{(2,2)} \propto [H_{(2,3)}, [H_{(2,2)}, H_{(2,3)}]] \propto [H_1^{(u)}, [H_{(3,0)}, H_{(2,3)}]] \in \mathcal{S}_{(6,0)}. \tag{4.23}$$

となる. ここで $H_{(3,0)} := [H_{(2,3)}, H_1^{(u)}] \in \mathcal{S}_{(3,0)}$ とした. $s = \text{Span}(\{H_{(2,2)}, H_{(2,3)}\}) \subset \mathcal{S}_{(2,0)}$ とするこで, Theorem 4.3 より $\text{Lie}(\{H_{(2,2)}, H_{(2,3)}, H_{(3,0)}\}) \subset \mathcal{S}_0$ が得られ, Example 4.5 の系は任意の $\mathfrak{su}(3) = \mathcal{S}_0 = \text{Lie}(\{H_{(2,2)}, H_{(2,3)}, H_{(3,0)}\})$ の元が不定定数 $\omega_1 \in [\omega_1^{(i)}, \omega_1^{(f)}]$, $\omega_2 \in [\omega_2^{(i)}, \omega_2^{(f)}]$ に対してロバスト制御可能であることがわかった.

以上のように, ドリフトハミルトニアンがない系に関しては d 次元系の複数の不定定数に対してロバスト制御が可能となる場合があることが示せた.

第 5 章

結論

本論文では 2 量子ビット系 (第 3 章) と特別な条件下での d 次元系 (第 4 章) での連続不定定数に対するロバスト制御について考察した. どちらの結果に関しても 1 量子ビットを超えるサイズの系に対するロバスト制御が可能な例を解析的に示した点がこの分野の進展への貢献である.

第 3 章では, 連続不定定数を含んださまざまな 2 量子ビット系に対してロバスト制御が可能となるための不定定数の値域に対する条件と, その条件が成立しているときに完全ロバスト制御が可能であることを多項式近似法を用いて示した. これらの結果はロバスト制御によって 2 量子ビット系に対する任意の量子ゲートの実装が可能であることを意味するため, 万能量子ゲートを実験系で実装するに有用となることが期待される. 実際, 本研究で取り上げた Example 3.3 の系は, NMR の核スピン系の不均一性によって生じる不定性のモデル化に対応し [28], この不定定数の値域がゼロを跨がない場合はロバスト制御が実装できることが解析的に示された. また, Example 3.9 の系はダイヤモンド NV 中心系において外部の核スピンによる制御不能な磁場の影響による不定性をモデル化した形になっており [30], 本研究の解析によってどのようなタイプの不定性であるかによって, どのような量子ゲートがロバスト制御によって実装できるかが明らかになった. 逆に, 不定定数の値域によってはロバスト制御が原理的に不可能である場合があることも示されたので, このような系を扱っている場合には系を制御する方法としてロバスト制御を採用すべきではないということも本研究によって示すことができる.

一方, 現実の物理系に即したモデルの系として解析したわけではないが, Example 3.2 の系のようにドリフトハミルトニアンに相互作用項に不定定数を持ち, かつ制御ハミルトニアンが 1 つしかない場合でも完全ロバスト制御が可能となることがあることがわかつ

た. さらに Example 3.4 や Example 3.5 の系のように複数の不定性を持った量子系に対しても, 局所的なハミルトニアンの制御性によって, 多くの場合でこれらの不定性に対して原理的に完全ロバスト制御が可能であることを示した. 第 2.2.1 項で導入した仮想ハミルトニアンを用いて GRAPE アルゴリズム (第 2.3.1 項) を実行することで, 複数の不定定数を持つ系に対してもロバスト制御パルスの導出が可能である. しかし, この仮想ハミルトニアンの次元を不定定数の数に対して指数的に大きくする必要があるので, 実際に複数の不定定数に対するロバスト制御パルスを見つけることは非常に困難であることが予想される. 従って実際の量子系での制御を考える場合において, 複数の不定定数に対するロバスト制御の有用性を明らかにすることは今後の課題の一つである.

第 3.1.2 項では多項式近似法ではロバスト制御性を示すことができない系を提示した. 2 量子ビット系である Example 3.6 では制御できるすべてのハミルトニアンの反転 (ハミルトニアン $H \rightarrow -H$) が実行可能か明らかでない系となっている. このような性質をもつハミルトニアン集合によって生成される量子ゲートは半群の性質をもつため, 群の性質を持つ系のように実装の不可能性を示すことができない. 一方で, この系は任意の離散不定定数に対してはロバスト制御可能である性質を持つ. そこで第 3.2 節では Example 3.6 の系に対するロバスト制御パルスを数値的に見つけることができるのかを解析した. その結果, エラーの評価関数 (3.62) の下で 10^{-5} の精度まで連続不定定数に対するロバスト制御が実行できる制御パルスを発見した. また, 1 量子ビット系で同様の問題が生じる Example 3.7 でも数値解析を行い, 高い精度で連続不定定数に対するロバスト制御が実現できる制御パルスを求めることができた. これらの結果から, 任意の離散化不定定数に対してロバスト制御が可能である, つまり Theorem 2.2 の (1) と (2) を満たす場合, 連続不定定数に対してもロバスト制御可能性を拡張できると予想する. この予想の解析的な証明は今後の課題となる. また, GRAPE アルゴリズムによるロバスト制御パルスの導出では, パルスの波形が矩形型となっているので, 実験系によってはこの制御パルスの実装が難しいという問題もある. そこで, 第 2.3.2 項で紹介した滑らかなパルスで最適化するアルゴリズムを用いた, 実際の実験系で必要とされる条件に即した形のロバスト制御パルスの導出も今後の課題となる.

第 4 章ではドリフトハミルトニアンを持たない d 次元系のロバスト制御が可能であるかを明らかにするための方法を求めた. ドリフトハミルトニアンがない場合はハミルトニアンの反転が自由に実行できるため, 交換子公式を用いた制御性の導出が可能となる. この性質を使うことで, 多項式近似によるロバスト制御性を導くアプローチが機能し, 第 4.1 節では不定定数が 1 つの場合, 第 4.2 節では複数の場合におけるロバスト制御可能性

をそれぞれ示すために必要な定理を導き、実際に幾つかの例に対してロバスト制御可能であることを証明した。これらの結果から、 d 次元系であっても、ドリフトハミルトニアンの反転の実行可能性さえ示すことができれば、与えられた系のロバスト制御可能性を解析的に示すことができることがわかった。今後は、不定定数を持ったドリフトハミルトニアンを持つ場合でのロバスト制御性を解析的に明らかにすることが課題となる。

謝辞

はじめに5年間もの間、至らぬ私に対して辛抱強くご指導して下さいました村尾教授には深く感謝しております。多くの議論や提案そして村尾先生自身の研究への情熱が、非常に心強く感じておりました。また、Aberystwyth大学のDaniel Burgarth先生や横浜国立大学の小坂先生との出会いは私の研究活動において重要な意味があり、これらの先生方を紹介して下さいましたこと関しても重ねて感謝申し上げます。また、村尾研究室の助教である添田さんからの研ぎ澄まされた鋭い意見やご指摘はこれまでの研究の大きな助けとなり、また今後の人生にも役立つ刺激的なものでした。添田さんから頂いた多くのご指導にも深く感謝いたします。

本研究のきっかけを与えてくれたDaniel Burgarth先生にも多くの助けをいただきました。短い期間の訪問だったにも関わらず、熱心に議論していただいたおかげで非常に充実した期間になりました。深く感謝しております。また、同先生の大学に訪問中にお世話になったAlexander Pitchford氏にも感謝いたします。彼からは研究に関わる数値計算に関する知識を共有してくれたことや大学周辺の文化などを経験させてくれるなど、新しい物に触れられる機会を与えてくれました。

また、5年間の間でお世話になった村尾研究室の学生として同じ時間を共有した、仲山将順博士、若桑江友里博士、秋笛清石博士、宮崎慈生博士、加藤孝太郎博士、新保厚博士、森祐樹さん、山崎隼汰さん、董青秀雄さん、横島亘さんとの出会いは、この5年間を非常に充実した色濃いものとなりました。皆様に感謝申し上げます。

本研究は博士課程教育リーディングプログラムの1つである、フォトンサイエンス・リーディング大学院によるさまざまな支援のおかげで成り立ちました。大変に感謝しております。

最後に、私の生活を応援や理解してくれた両親と妹にも感謝するスペースをいただきます。

参考文献

- [1] M. A. Nielsen and I.L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*. (Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2000).
- [2] W. K. Wootters and W. H. Zurek, A single quantum cannot be cloned. *Nature* **299**, 802 (1982).
- [3] R. P. Feynman, Simulating Physics with Computers. *Int. J. Theor. Phys. A* **21**, 467 (1982)
- [4] S. Lloyd, Universal Quantum Simulators. *Science* **273**, 1073 (1996).
- [5] P. W. Shor, Algorithms for quantum computation: Discrete logarithms and factoring. *Proc. 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science, IEEE Computer Society Press* 124 (1994).
- [6] L. K. Grover, Quantum Mechanics Helps in Searching for a Needle in a Haystack. *Phys. Rev. Lett.* **79**, 325 (1997).
- [7] C. H. Bennett, G. Brassard, C. Crepeau, R. Jozsa, A. Peres and W. K. Wootters, Teleporting an Unknown Quantum State via Dual Classical and Einstein-Podolsky-Rosen Channels. *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1895 (1993).
- [8] L. Vaidman, Teleportation of quantum states. *Phys. Rev. A* **49**, 1473 (1994).
- [9] C. H. Bennett and G. Brassard, Quantum cryptography: Public key distribution and coin tossing. In *Proc. IEEE Int. Conf. Comput. Syst. Signal Process.* 175 (1984).
- [10] C. H. Bennett, Quantum cryptography: Uncertainty in the service of privacy. *Science*, **257**, 752 (1992).
- [11] A. K. Ekert, Quantum Cryptography Based on Bell's Theorem. *Phys. Rev. Lett.* **67**, 661 (1991).
- [12] A. R. Calderbank and P. W. Shor, Good quantum error-correcting codes exist.

- Phys. Rev. A* **54**, 1098 (1995).
- [13] A. M. Steane, Multiple particle interference and quantum error correction. *Proc. Roy. Soc. Lond. A* **452**, 2551 (1996).
- [14] A. Y. Kitaev, Quantum computations: algorithms and error correction. *Russ. Math. Surv.* **52**, 1191 (1997).
- [15] D. D'Alessandro, *Introduction to Quantum Control and Dynamics*. (Chapman and Hall/CRC, 2008).
- [16] D. Dong and I. A. Petersen, Quantum control theory and applications: a survey. *IET Control Theory A.* **4**, 2651 (2010).
- [17] A. Berenco, C. H. Bennett, R. Cleve, D. P. DiVincenzo, N. Margolus, P. Shor, T. Sleator, J. A. Smolin and H. Weinfurter, *Phys. Rev. A* **52**, 3457 (1995).
- [18] P. O. Boykin, T. Mor, M. Pulver, V. P. Roychowdhury and F. Vatan, On Universal and Fault-Tolerant Quantum Computing: A Novel Basis and a New Constructive Proof of Universality for Shor's Basis. *Proc. 40th FOCS* 486 (1999).
- [19] G. H. Low and I. L. Chuang, Optimal Hamiltonian Simulation by Quantum Signal Processing. *Phys. Rev. Lett.* **118**, 010501 (2017).
- [20] D. W. Berry, A. M. Childs and R. Kothari, Hamiltonian Simulation with Nearly Optimal Dependence on all Parameters. *2015 IEEE 56th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, 792 (2015).
- [21] F. G. S. L. Brandão and K. Svore. Quantum speed-ups for semidefinite programming. In *58th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science. IEEE*, (2017).
- [22] J. van Apeldoorn, A. Gilyén, S. Gribling and R. de Wolf, Quantum SDP-solvers: Better upper and lower bounds. In *58th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science. IEEE*, (2017).
- [23] F. G. S. L. Brandão, A. Kalev, T. Li, C. Y.-Y. Lin, K. M. Svore, X. Wu, Quantum SDP Solvers: Large Speed-ups, Optimality, and Applications to Quantum Learning. arXiv:1710.02581, (2018).
- [24] A. M. Childs, R. Kothari and R. D. Somma, Quantum Algorithm for Systems of Linear Equations with Exponentially Improved Dependence on Precision. *SIAM J. Comput.*, **46**, 1920 (2017).
- [25] H. J. Sussmann, Controllability of Nonlinear Systems. *J. Diff. Eqns.* **12**, 95 (1972).

- [26] V. Jurdjevic and H. J. Sussmann, Control systems on Lie Groups. *J. Diff. Eqns.* **12**, 313 (1972).
- [27] S. J. Glaser¹, U. Boscain, T. Calarco, C. P. Koch, W. Köckenberger, R. Kosloff, I. Kuprov, B. Luy, S. Schirmer, T. Schulte-Herbrüggen, D. Sugny and F. K. Wilhelm, Training Schrödinger's cat: quantum optimal control *Eur. Phys. J. D* **69**, 279 (2015).
- [28] M. H. Levitt, Composite pulses. *Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc.* **18**, 61 (1986).
- [29] L. M. K. Vandersypen and I. L. Chuang, NMR techniques for quantum control and computation. *Rev. Mod. Phys.* **76**, 1037 (2004).
- [30] M. W. Doherty, N. B. Manson, P. Delaney, F. Jelezko, J. Wrachtrup, L. C.L. Hollenberg, The nitrogen-vacancy colour centre in diamond. *Phys. Rep.* **528**, 1 (2013).
- [31] F. Dolde, V. Bergholm, Y. Wang, I. Jakobi, B. Naydenov, S. Pezzagna, J. Meijer, F. Jelezko, P. Neumann, T. S.-Herbrüggen, J. Biamonte and J. Wrachtrup, High-fidelity spin entanglement using optimal control. *Nat. Commun.* **5**, 3371 (2014).
- [32] T. Nöbauer, A. Angerer, B. Bartels, M. Trupke, S. Rotter, J. Schmiedmayer, F. Mintert, and J. Majer, Smooth Optimal Quantum Control for Robust Solid-State Spin Magnetometry. *Phys. Rev. Lett.* **115**, 190801 (2015).
- [33] G. Falci, R. Fazio, G. M. Palma, J. Siewert and V. Vedral, Detection of geometric phases in superconducting nanocircuits. *Nature* **407**, 355 (2000).
- [34] J. Clarke and F. K. Wilhelm, Superconducting quantum bits. *Nature* **453**, 1031 (2008).
- [35] N. Lambert, Y. Matsuzaki, K. Kakuyanagi, N. Ishida, S. Saito and F. Nori, Superradiance with an ensemble of superconducting flux qubits. *Phys. Rev. B* **94**, 224510 (2016).
- [36] D. Burgarth, S. Bose, C. Bruder and V. Giovannetti, Local controllability of quantum networks. *Phys. Rev. A* **79**, 060305(R) (2009).
- [37] D. Burgarth, K. Maruyama, M. Murphy, S. Montangero, T. Calarco, F. Nori and M. B. Plenio, Scalable quantum computation via local control of only two qubits. *Phys. Rev. A* **81**, 040303(R) (2010).
- [38] R. Heule, C. Bruder, D. Burgarth and V.M. Stojanović, Controlling qubit arrays with anisotropic XXZ Heisenberg interaction by acting on a single qubit. *Eur.*

- Phys. J. D* **63**, 41 (2011) numerical に minimum time を見つける.
- [39] C. O’Meara, G. Dirr, T. Schulte-Herbrüggen, Illustrating the Geometry of Coherently Controlled Unital Open Quantum Systems. *IEEE Trans. Automat. Contr.* (IEEE-TAC) **57**, 2050 (2012).
- [40] G. Dirr, U. Helmke, I. Kurniawan and T. Schulte-Herbrüggen, Lie-semigroup structures for reachability and control of open quantum systems: kossakowski-lindblad generators form lie wedge to markovian channels *Rep. Math. Phys.* **64**, 93 (2009).
- [41] N. Khaneja and S. J. Glaser, Cartan decomposition of $SU(2^n)$ and control of spin systems. *Chem. Phys.* **267**, 11 (2001).
- [42] U. Boscain, T. Chambrion and J.-P. Gauthier, On the $K + P$ Problem for a Three-Level Quantum System: Optimality Implies Resonance. *Control Syst.* **8**, 547 (2002).
- [43] E. Assémat, M. Lapert, Y. Zhang, M. Braun, S. J. Glaser and D. Sugny, Simultaneous time-optimal control of the inversion of two spin- $\frac{1}{2}$ particles. *Phys. Rev. A* **82**, 013415 (2010).
- [44] A. Garon, S. J. Glaser, D. Sugny, Time-optimal control of $SU(2)$ quantum operations. *Phys. Rev. A* **88**, 043422 (2013).
- [45] N. Khaneja, R. Brockett and S J. Glaser, Time optimal control in spin systems. *Phys. Rev. A* **63**, 032308 (2001).
- [46] N. Khaneja, S. J. Glaser and R. Brockett, Sub-Riemannian geometry and time optimal control of three spin systems: Quantum gates and coherence transfer. *Phys. Rev. A* **65**, 032301 (2002).
- [47] U. Boscain and P. Mason, Time minimal trajectories for a spin 1/2 particle in a magnetic field. *J. Math. Phys.* **47**, 062101 (2006)
- [48] A. Garon, S. J. Glaser, D. Sugny, Time-optimal control of $SU(2)$ quantum operations. *Phys. Rev. A* **88**, 043422 (2013).
- [49] F. Albertini and D. D’Alessandro, Time-Optimal Control of a Two Level Quantum System via Interaction With an Auxiliary System. *IEEE Trans. Automat. Contr.* **59**, 3026 (2014).
- [50] R. Romano and D. D’Alessandro, Minimum time control of a pair of two-level quantum systems with opposite drifts. *J. Phys. A: Math. Theor.* **49**, 345303 (2016).

- [51] L. Van Damme, Q. Ansel, S. J. Glaser and D. Sugny, Robust optimal control of two-level quantum systems. *Phys. Rev. A* **95**, 063403 (2017).
- [52] D. D'Alessandro and M. Dahled, Optimal Control of Two-Level Quantum Systems. *IEEE Trans. Automat. Contr.* **46**, 866 (2001).
- [53] C. Arenz, B. Russell, D. Burgarth and H. Rabitz, The roles of drift and control field constraints upon quantum control speed limits. *New J. Phys.* **19**, 103015 (2017).
- [54] J. Lee, C. Arenz, H. Rabitz and B. Russell, Dependence of the quantum speed limit on system size and control complexity. *New J. Phys.* **20**, 063002 (2018).
- [55] G. Turinici, V. Ramakrishna, B. Li and H. Rabitz, Optimal discrimination of multiple quantum systems: controllability analysis. *J. Phys. A: Math. Gen.* **37**, 273 (2004).
- [56] G. Turinici and H. Rabitz, Optimally controlling the internal dynamics of a randomly oriented ensemble of molecules. *Physical Review A* **70**, 063412 (2004).
- [57] M. Belhadj, J. Salomon, G. Turinici, Ensemble controllability and discrimination of perturbed bilinear control systems on connected, simple, compact Lie groups. *Euro. J. Control* **22**, 23 (2015).
- [58] G. Dirr, U. Helmke, F. Ruppel, Accessibility of bilinear networks of systems: control by interconnections. *Math. Control Signals Syst.* **28**, 14 (2016).
- [59] J.-S. Li and N. Khaneja, Control of inhomogeneous quantum ensembles. *Phys. Rev. A* **73**, 030302 (2006).
- [60] J.-S. Li and N. Khaneja, Ensemble controllability of the Bloch equations. *IEEE Trans. Autom. Control* **54**, 528 (2009).
- [61] K. Beauchard, J.-N. Coron and P. Rouchon, Controllability Issues for Continuous-Spectrum Systems and Ensemble Controllability of Bloch Equations. *Commun. Math. Phys* **296**, 525 (2010).
- [62] Z. Leghtas¹, A. Sarlette and P. Rouchon, Adiabatic passage and ensemble control of quantum systems. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **44**, 154017 (2011).
- [63] E. Assémat, M. Lapert, Y. Zhang, M. Braun, S. J. Glaser and D. Sugny, Simultaneous time-optimal control of the inversion of two spin- $\frac{1}{2}$ particles. *Phys. Rev. A* **82**, 013415 (2010).
- [64] L. Van Damme, Q. Ansel, S. J. Glaser and D. Sugny, Robust optimal control of two-level quantum systems. *Phys. Rev. A* **95**, 063403 (2017).

- [65] H. Rabitz, R. de Vivie-Riedle, M. Motzkus and K. Kompa, Whither the Future of Controlling Quantum Phenomena? *Science*, **288** (2000).
- [66] J. Watrous, *Theory of Quantum Information*. (Cambridge Univ. Press, 2018).
- [67] H. Georgi Lie Algebras In Particle Physics: from Isospin To Unified Theories. (Avalon Publishing, 1999).
- [68] H. F. Trotter, On the product of semi-groups of operators. *Proc. Am. Math. Soc.* **10**, 545 (1959).
- [69] M. Suzuki, Generalized Trotter's formula and systematic approximations of exponential operators and inner derivations with applications to many-body problems. *Commun. Math. Phys.* **51**, 183 (1976).
- [70] P. Bocchieri and A. Loinger, Quantum Recurrence Theorem. *Phys. Rev.* **107**, 337 (1957).
- [71] S. G. Schirmer, H. Fu, and A. I. Solomon, Complete controllability of quantum systems. *Physical Review A* **63**, 063140 (2001).
- [72] R. Zeier and T. S.-Herbrüggen, Symmetry principles in quantum systems theory. *Journal of Mathematical Physics* **52**, 113510 (2011).
- [73] N. Khaneja, T. Reiss, C. Kehlet, T. S.-Herbrüggen, and S. J. Glaser, Optimal control of coupled spin dynamics: design of NMR pulse sequences by gradient ascent algorithms. *J. Magn. Reson.* **172**, 296 (2005).
- [74] R. M. Wilcox, Exponential Operators and Parameter Differentiation in Quantum Physics. *J. Math. Phys.* **8**, 962 (1967).
- [75] J. Johansson, P. Nation and F. Nori, QuTiP: An open-source Python framework for the dynamics of open quantum systems. *Comp. Phys. Comm.* **183**, 1760 (2012).
- [76] J. Johansson, P. Nation and F. Nori, QuTiP 2: A Python framework for the dynamics of open quantum systems. *Comp. Phys. Comm.* **184**, 1234 (2013).
- [77] B. Bartels and F. Mintert, Smooth optimal control with Floquet theory. *Phys. Rev. A* **88**, 052315 (2013).
- [78] D. Daems, A. Ruschhaupt D. Sugny and S. Guèrin, Robust Quantum Control by a Single-Shot Shaped Pulse. *Phys. Rev. Lett.* **111**, 050404 (2013).
- [79] L. V.-Damme, D. Schraft, G. T. Genov, D. Sugny, T. Halfmann and S. Guèrin, Robust NOT gate by single-shot-shaped pulses: Demonstration of the efficiency of the pulses in rephasing atomic coherences. *Phys. Rev. A* **96**, 022309 (2017).

-
- [80] S. Machnes, E. Assémat, D. J. Tannor and F. K. Wilhelm, Tunable, flexible, and efficient optimization of control pulses for practical qubits. *Phys. Rev. Lett.* **120**, 150401 (2018).
- [81] R. L. Kosut, M. D. Grace, and C. Brif, Robust control of quantum gates via sequential convex programming. *Phys. Rev. A* **88**, 052326 (2013).
- [82] C. Chen, D. Dong, R. Long, I. R. Petersen and H. A. Rabitz, Sampling-based learning control of inhomogeneous quantum ensembles. *Phys. Rev. A* **89**, 023402 (2014).
- [83] D. Dong, C. Wu, C. Chen, B. Qi, I. R. Petersen and F. Nori, Learning robust pulses for generating universal quantum gates. *Sci. Rep.* **6**, 36090 (2016).
- [84] C. Chen, D. Dong, B. Qi, I. R. Petersen and H. Rabitz, Quantum Ensemble Classification: A Sampling-Based Learning Control Approach. *IEEE Trans. Neural Netw. Learn. Syst.* **28**, 1345 (2017).
- [85] T. Caneva, T. Calarco and S. Montangero, Chopped random-basis quantum optimization. *Phys. Rev. A* **84**, 022326 (2011).
- [86] S. Heubach and T. Mansour, Compositions of n with parts in a set. *Congressus Numerantium* **168**, 33 (2004).

付録 A

第 2 章の補助

A.1 Example 2.3 に関する補足

Example 2.3 では 1 次元で連なった Heisenberg モデルの n 量子ビット系について、全ての $k \in [n-1]$ による量子ビット $k, k+1$ に対して、任意の $\mathfrak{su}(4)$ に属するハミルトニアンが制御可能であることを示した。ここではこの条件の下で全系 (n 量子ビット) に対して任意の $\mathfrak{su}(2^n)$ の元が制御可能であることを示す。そのためにまず、 k ($k < n$) 番目の量子ビットまでは任意の $\mathfrak{su}(2^k)$ の元が制御でき、また $k, k+1$ 番目の量子ビットに対して任意の $\mathfrak{su}(4)$ の元が制御できるとする。このとき、 $k+1$ 番目までの量子ビットに対して任意の $\mathfrak{su}(2^{k+1})$ の元の制御が可能であることを示す。

Lemma A.1 任意の $k \in \mathbb{N}$ に対して、 $\mathfrak{l}_k := \{\bar{l} \otimes \mathbf{1}^{(k+1)} \mid \bar{l} \in \mathfrak{su}(2^k)\} \subset \mathfrak{su}(2^{k+1})$ と $\mathfrak{g}_k := \{\mathbf{1}^{(1)} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}^{(k-1)} \otimes \bar{g} \mid \bar{g} \in \mathfrak{su}(4)\} \subset \mathfrak{su}(2^{k+1})$ とすると、 $\mathfrak{su}(2^{k+1}) = \text{Lie}(\mathfrak{l}_k \cup \mathfrak{g}_k)$ となる。

Lemma A.1 を示すことで帰納的に Example 2.3 の系が完全制御可能であることが示せる。

Lemma A.1 の証明— $\mathfrak{h}_k := \{i\bar{g} \otimes \bar{\sigma}_\mu^{(k+1)} \mid \bar{g} \in \mathfrak{su}(2^k), \mu = 1, 2, 3\}$ を定義する。このとき、 $\mathfrak{h}_k \subset \mathfrak{su}(2^{k+1})$ かつ $\mathfrak{h}_k \cap \mathfrak{l}_k = \phi$ であり、 \mathfrak{h}_k の次元は $(2^{2k}-1) \times (2^2-1)$ である。また、 $\mathfrak{l}_k \cap \mathfrak{g}_k = \text{Span}(\{\bar{\sigma}_\mu^{(k)} \mid \mu = 1, 2, 3\})$ 、 $\mathfrak{h}_k \cap \mathfrak{g}_k = \text{Span}(\{i\bar{\sigma}_\mu^{(k)} \otimes \bar{\sigma}_\nu^{(k+1)} \mid \mu, \nu = 1, 2, 3\})$ なのでこれらの次元はそれぞれ 3 と 9 である。従って、 $(\mathfrak{l}_k \cup \mathfrak{g}_k \cup \mathfrak{h}_k) \subset \mathfrak{su}(2^{k+1})$ の次元は $2^{2k}-1 + 15 + (2^{2k}-1) \times (2^2-1) - 3 - 9 = 2^{2k+1}-1$ となることから $\mathfrak{su}(2^{k+1})$ の次元と一致する。よって、 \mathfrak{l}_k と \mathfrak{g}_k から \mathfrak{h}_k の制御性を示すことができれば良い。

任意の $\bar{H} \in \mathfrak{su}(2^k)$ は量子ビット 1 から $k-1$ に対する $\bar{H}_0, \bar{H}_\mu \in \mathfrak{su}(2^{k-1})$ と $\alpha_\mu \in \mathbb{R}$ ($\mu = 1, 2, 3$) を用いて,

$$\bar{H} = -i \sum_{\mu=1}^3 \bar{H}_\mu \otimes \bar{\sigma}_\mu^{(k)} + \bar{H}_0 \otimes \mathbf{1}^{(k)} + \sum_{\mu=1}^3 \alpha_\mu \bar{\sigma}_\mu^{(k)} \quad (\text{A.1})$$

のように分解できる. また任意の $\nu = 1, 2, 3$ に対して, $i\bar{H} \otimes \bar{\sigma}_\nu^{(k+1)} \in \mathfrak{h}_k$ を式 (A.1) によって分解した場合, $i\alpha_\mu \bar{\sigma}_\mu^{(k)} \otimes \bar{\sigma}_\nu^{(k+1)}$ の項に関しては \mathfrak{g}_k に属するのすでに制御可能である. また, $\bar{H}_\mu \otimes \bar{\sigma}_\mu^{(k)} \otimes \bar{\sigma}_\nu^{(k+1)}$ は完全版対象テンソル $\varepsilon_{\zeta\eta\mu} = -1$ となる ζ, η を用いて, $\bar{L}_{\mu\zeta} := i\bar{H}_\mu \otimes \bar{\sigma}_\zeta^{(k)} \otimes \mathbf{1}^{(k+1)} \in \mathfrak{l}_k$ と $\bar{G}_{\eta\nu} := i\bar{\sigma}_\eta^{(k)} \otimes \bar{\sigma}_\nu^{(k+1)} \in \mathfrak{g}_k$ とすると, $[\bar{L}_{\mu\zeta}, \bar{G}_{\eta\nu}] = \bar{H}_\mu \otimes \bar{\sigma}_\mu^{(k)} \otimes \bar{\sigma}_\nu^{(k+1)}$ となる. また, $\bar{L}_{0\zeta} := i\bar{H}_0 \otimes \bar{\sigma}_\zeta^{(k)} \otimes \mathbf{1}^{(k+1)} \in \mathfrak{l}_k$ を用いて $[\bar{L}_{0\zeta}, \bar{G}_{\zeta\nu}] = \bar{H}_0 \otimes \mathbf{1}^{(k)} \otimes \bar{\sigma}_\nu$ となり交換子公式から制御可能となる. これらの線型和は Trotter 公式から制御可能なので, 任意の \mathfrak{h}_k の元が制御可能となる. \square

A.2 Theorem 2.2 の証明

ここでは, Theorem 2.2 の証明を行う.

まず, (2) の条件が必要条件であることを示す. その後, (1) と (2) がアンサンブル制御可能となるための十分条件であることを示す.

(2) の条件が必要条件であることの証明— (2) で定義したような同型写像 $\phi_{nn'} : \mathcal{L}_n \rightarrow \mathcal{L}_{n'}$ が存在する場合, この写像は定義から一意に決まる. 従って, $\bar{H}_n(t)$ を持つ系に対して制御したいハミルトニアンが $\bar{H}_1 \in \mathcal{L}_n$ である場合, $\bar{H}_{n'}(t)$ を持つ系で制御されるハミルトニアンは $\phi_{nn'}(\bar{H}_1) \in \mathcal{L}_{n'}$ のように一意に決まる. また, 全ての $t \in \mathbb{R}$ に対して $\bar{H}_{n'}(t) = \phi_{nn'}(\bar{H}_n(t))$ が成り立つので Baker-Campbell-Hausdorff の公式より任意の $\bar{h}, \bar{g} \in \mathcal{L}_n$ は

$$e^{\bar{h}} e^{\bar{g}} = \exp \{ \bar{h} + \bar{g} + [\bar{h} \text{ と } \bar{g} \text{ の多重交換子}] \} \quad (\text{A.2})$$

となる. 式 (A.2) の右辺の指数部分は \mathcal{L}_n に属するので, それを $\bar{c} \in \mathcal{L}_n$ とすると

$$\begin{aligned} e^{\phi_{nn'}(\bar{h})} e^{\phi_{nn'}(\bar{g})} &= \exp \{ \phi_{nn'}(\bar{h}) + \phi_{nn'}(\bar{g}) + [\phi_{nn'}(\bar{h}) \text{ と } \phi_{nn'}(\bar{g}) \text{ の多重交換子}] \} \\ &= \exp \{ \phi_{nn'}(\bar{h} + \bar{g} + [\bar{h} \text{ と } \bar{g} \text{ の多重交換子}]) \} \\ &= e^{\phi_{nn'}(\bar{c})} \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

が得られる． $\phi_{nn'}$ は一意なので任意の $\bar{h} \in \mathcal{L}_n$ に対して $\Phi_{nn'}(e^{\bar{h}}) = e^{\phi_{nn'}(\bar{h})}$ を満たす写像 $\Phi_{nn'}$ も一意に定まり，条件 (2) を満たすときはアンサンプル制御が不可能であることがわかる．

(1) と (2) の条件が十分条件であることの証明— この命題の対偶，つまり条件 (2) で定義した写像が存在することは条件 (1) を満たす際にアンサンプル制御が不可能であることの十分条件であることを示す．

仮定としてアンサンプル制御が不可能な場合，つまりハミルトニアン $\bar{H}_j(t)$, ($j = 1, \dots, M$) の系（以後それぞれ“(j)-系”と呼ぶ）の中でアンサンプル制御が不可能になる最小の整数 $M \leq N$ が存在する場合を考える．このとき (1)-系から $(M-1)$ -系は互いに依存せずにアンサンプル制御可能となり，1 つ系に関してはそれぞれ制御可能であるので少なくとも $M \geq 2$ となることがわかる． \mathcal{G} をこの M 個の系に対して定義した $\mathbb{H}(t)$ で制御可能なハミルトニアンの集合であるとし，以後この M 個の系に注目して証明を行う．

まず， (M) -系へのみ制御可能となる Lie 代数

$$\mathfrak{g}_M := \{g \in \mathcal{L}_M \mid 0 \oplus 0 \oplus \cdots \oplus g \in \mathcal{G}\} \quad (\text{A.4})$$

とする．また任意の $g_M \in \mathcal{L}_M$ に対して $g_1 \oplus g_2 \oplus \cdots \oplus g_M \in \mathcal{G}$ となる， $g_1 \in \mathcal{L}_1$, $g_2 \in \mathcal{L}_2, \dots, g_{M-1} \in \mathcal{L}_{M-1}$ が存在するので， $g \in \mathfrak{g}_M$ に対して $[g_1 \oplus \cdots \oplus g_M, 0 \oplus \cdots \oplus 0 \oplus g] = 0 \oplus \cdots \oplus 0 \oplus [g_M, g] \in \mathcal{G}$ となる．よって条件 (1) から \mathfrak{g}_K は $\{0\}$ または \mathcal{L}_M であり，仮定よりこの系はアンサンプル制御が不可で且つ，(1)-系から $(M-1)$ -系まではアンサンプル制御が可能であることから $\mathfrak{g}_K = \{0\}$ であることがわかる．

$\mathfrak{g}_K = \{0\}$ であることから，任意の $g_1 \in \mathcal{L}_1$, $g_2 \in \mathcal{L}_2, \dots, g_{M-1} \in \mathcal{L}_{M-1}$ に対して $g_1 \oplus g_2 \oplus \cdots \oplus g_{M-1} \oplus g_M \in \mathcal{G}$ を満たす $g_M \in \mathcal{L}_M$ が一意に決まる．そこで $\mathcal{G}^{(M-1)} := \bigoplus_{m=1}^{M-1} \mathcal{L}_m$ として

$$\phi(h) = g_M \iff h \oplus g_M \in \mathcal{G} \quad (\text{A.5})$$

を満たす写像 $\phi: \mathcal{G}^{(M-1)} \rightarrow \mathcal{L}_M$ を定義すると，特に $\phi(\bar{H}_{d,1} \oplus \cdots \oplus \bar{H}_{d,M-1}) = \bar{H}_{d,M}$ と任意の $k \in [K]$ に対して $\phi(\bar{H}_{c,1}^{(k)} \oplus \cdots \oplus \bar{H}_{c,M-1}^{(k)}) = \bar{H}_{c,M}^{(k)}$ を満たす．また， ϕ は式 (2.14), (2.15) を満たすため Lie 代数 $\mathcal{G}^{(M-1)} \rightarrow \mathcal{L}_M$ の準同型写像であり， $\phi(0) = 0$ であることがわかる．

今, $m \in [M-1]$, $g_m \in \mathcal{L}_m$ に対して

$$\phi_m(g_m) := \phi(\underbrace{0 \oplus \cdots \oplus 0}_{m-1} \oplus g_m \oplus \underbrace{0 \oplus \cdots \oplus 0}_{M-m-1}) \quad (\text{A.6})$$

を満たす写像 $\phi_m: \mathcal{L}_m \rightarrow \mathcal{L}_M$ を定義する. これは Lie 代数 $\mathcal{L}_m \rightarrow \mathcal{L}_M$ の準同型写像である. 今, $g_m \in \mathcal{L}_m$ が $\phi_m(g_m) = 0$ を満たすとすると,

$$\underbrace{0 \oplus \cdots \oplus 0}_{m-1} \oplus g_m \oplus \underbrace{0 \oplus \cdots \oplus 0}_{M-m} \in \mathcal{G} \quad (\text{A.7})$$

を意味するが, 全ての $m \in [M-1]$ に対して $g_m \neq 0$ が存在する場合は, $\mathfrak{g}_M = \{0\}$ を示した方法と同様に M 個の系に対してアンサンブル制御が可能となってしまうため, 少なくとも 1 つは $\phi_{m^*}(g_{m^*}) = 0$ であるとき必ず $g_{m^*} = 0$ となる $m^* \in [M-1]$ が存在し, すなわち ϕ_{m^*} は単射となる.

以上の性質を満たす m^* が 2 つ以上存在する場合は 1 つを残して取り除いたとしても一般性は失わないため, ただ 1 つであることすると, (m^*) -系を除いた $M-1$ 個の系に関してはアンサンブル制御が可能であることがわかる. 簡単のため $m^* = 1$ とすると, 任意の $g_2 \in \mathcal{L}_2, \dots, g_M \in \mathcal{L}_M$ に対して, $g_1 \oplus g_2 \oplus \cdots \oplus g_M \in \mathcal{G}$ を満たす $g_1 \in \mathcal{L}_1$ が存在する. よって $g_2 = \cdots = g_{M-1} = 0$ とすると, $\phi_1(g_1) = g_M$ を満たす g_1 が存在するので ϕ_1 は全単射となることがわかる. 従って, ϕ_1 は Lie 代数 \mathcal{L}_1 と \mathcal{L}_M 間の同型写像になっている.

今, $\mathcal{G}_2^{(M-1)} := \bigoplus_{m=2}^{M-1} \mathcal{L}_m$ とすると, 任意の $g_1 \in \mathcal{L}_1$ と $h \in \mathcal{G}_2^{(M-1)}$ に対して

$$\begin{aligned} g_1 \oplus 0 \oplus \cdots \oplus 0 \oplus \phi_1(g_1) &\in \mathcal{G}, \\ 0 \oplus h \oplus \phi(0 \oplus h) &\in \mathcal{G} \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

となり, 写像 ϕ の交換子の保存性から

$$[\phi_1(g_1), \phi(0 \oplus h)] = [\phi(g_1 \oplus 0 \oplus \cdots \oplus 0), \phi(0 \oplus h)] = 0 \quad (\text{A.9})$$

が得られる. $g_1 \in \mathcal{L}_1$ は任意であり $\phi_1: \mathcal{L}_1 \rightarrow \mathcal{L}_M$ は同型写像であることから全ての $g_M \in \mathcal{L}_M$ に対して $\phi(0 \oplus h)$ は可換でなくてはならず, すなわち任意の $h \in \mathcal{G}_2^{(M-1)}$ に対して $\phi(0 \oplus h) = 0$ となることがわかる. 従って任意の $k \in [K]$ に対して

$$\begin{aligned} \bar{H}_{d,M} &= \phi(\bar{H}_{d,1} \oplus \bar{H}_{d,2} \oplus \cdots \oplus \bar{H}_{d,M-1}) \\ &= \phi(\bar{H}_{d,1} \oplus 0 \oplus \cdots \oplus 0) + \phi(0 \oplus \bar{H}_{d,2} \oplus \cdots \oplus \bar{H}_{d,M-1}) = \phi_1(\bar{H}_{d,1}), \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

$$\begin{aligned} \bar{H}_{c,M}^{(k)} &= \phi(\bar{H}_{c,1}^{(k)} \oplus \bar{H}_{c,2}^{(k)} \oplus \cdots \oplus \bar{H}_{c,M-1}^{(k)}) \\ &= \phi(\bar{H}_{c,1}^{(k)} \oplus 0 \oplus \cdots \oplus 0) + \phi(0 \oplus \bar{H}_{c,2}^{(k)} \oplus \cdots \oplus \bar{H}_{c,M-1}^{(k)}) = \phi_1(\bar{H}_{c,1}^{(k)}) \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

となり, 条件 (2) で定義される同型写像が存在することが示された. \square

付録 B

第 3 章の補助

B.1 Example 3.2 の制御性

$\text{Lie}(\{\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}, \mathbf{1} \otimes \mathfrak{su}(2), i\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1, i\bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2\}) = \mathfrak{su}(4)$ となることを示す.

$$i\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3 = [\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}, [\mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_1, i\bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2]] \quad (\text{B.1})$$

となるので, $i\bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3$ が制御可能であり, Trotter 公式から 2 量子ビットの Heisenberg 相互作用 $i(\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2 + \bar{\sigma}_3 \otimes \bar{\sigma}_3)$ も制御可能となる. ハイゼンベルグ相互作用と $\mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_1, \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_3$ による制御は Example 2.3 によって完全制御可能であることを示したので, $\text{Lie}(\{\bar{\sigma}_1 \otimes \mathbf{1}, \mathbf{1} \otimes \mathfrak{su}(2), i\bar{\sigma}_1 \otimes \bar{\sigma}_1, i\bar{\sigma}_2 \otimes \bar{\sigma}_2\}) = \mathfrak{su}(4)$ となることがわかる.

B.2 Example 3.5 の補助

ここでは Example 3.5 で定義したドリフトハミルトニアン $\bar{H}_d(\omega)$ の反転 ($-\bar{H}_d(\omega)$) の制御性を示す. その前にまず, 1 量子ビットのハミルトニアンの反転について証明する.

Lemma B.1 - 1 量子ビットの未知ハミルトニアンの反転 -

ある正の有限な実数 $B < \infty$ とし, 1 量子ビット系のハミルトニアン \bar{h} が $\nu_j \in [-B, B]$ ($j = 1, 2, 3$) を用いて

$$\bar{h} = \sum_{j=1}^3 \nu_j \bar{\sigma}_j \quad (\text{B.2})$$

で記述されるとする. \bar{h} がドリフトハミルトニアンである場合に, 制御ハミルトニアン $\mathcal{S}_c = \{\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_3\}$ によって ν_j に依らずに $-\bar{h}$ の制御が可能である.

Lemma B.1 の証明— $\pm\bar{\sigma}_j$ ($j = 1, 2, 3$) に関しては制御可能であるので Lemma 2.6 を用いると,

$$\bar{g}_j := (2\bar{\sigma}_j)\bar{h}(-2\bar{\sigma}_j) = -\bar{h} + 2\nu_j\bar{\sigma}_j \quad (\text{B.3})$$

が制御できる. 仮定より \bar{g}_j は有界なので Trotter 公式が使え, $\bar{h} = \sum_{j=1}^3 \bar{g}_j$ が制御可能となる. \square

以上の結果を用いて 2 量子ビットに関するドリフトハミルトニアン of 反転の可能性を示す. まず, $\pm\bar{\sigma}_l \otimes \mathbf{1}$ ($l = 1, 2, 3$) に関しては制御可能であることから Lemma 2.6 より

$$\bar{H}_l(\omega) := (2\bar{\sigma}_l \otimes \mathbf{1})\bar{H}_d(\omega)(-2\bar{\sigma}_l \otimes \mathbf{1}) = -\bar{H}_d(\omega) + 2i \sum_{j'=0,l}^3 \sum_{k=0}^3 \omega_{j'k} \bar{\sigma}_{j'} \otimes \bar{\sigma}_k, \quad (\text{B.4})$$

が制御可能となる. よって, Trotter 公式から

$$\bar{G}(\omega) := \sum_{l=1}^3 \bar{H}_l(\omega) = -\bar{H}_d(\omega) + 4 \sum_{k=1}^3 \omega_{0k} \mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_k, \quad (\text{B.5})$$

の制御性も示され, $\bar{H}_d(\omega)$ の制御性から 1 量子ビットハミルトニアン $\bar{h} := \sum_{k=1}^3 \omega_{0k} \bar{\sigma}_k$ とすると $\mathbf{1} \otimes \bar{h}$ も制御可能となる. $\pm\mathbf{1} \otimes \bar{\sigma}_l$ ($l = 1, 2, 3$) の制御性と Lemma B.1 の結果から, $-\mathbf{1} \otimes \bar{h}$ の制御ができることになる. 従って Trotter 公式から $-\bar{H}_d(\omega) = \bar{G}(\omega) - 4\mathbf{1} \otimes \bar{h}$ の制御性も示され, ドリフトハミルトニアン of 反転ダイナミクスがシミュレート可能となる.

B.3 Corollary 3.1, 3.2 の証明

まず Corollary 3.1 を証明するために以下を証明する.

Corollary B.1 - 2 ハミルトニアンに対する Trotter 分解 -

任意の $t > 0$ と $\varepsilon > 0$ に対して, 2 個のノルムが 1 のハミルトニアン \bar{H}_1, \bar{H}_2 の制御が可能であるとする. このとき, $\mathcal{O}(1)$ の $\alpha_1, \alpha_2 > 0$ を用いて $\bar{H} := \alpha_1 \bar{H}_1 + \alpha_2 \bar{H}_2$ を Trotter 分解によってシミュレートしようとする,

$$\mathcal{T}_{\bar{H}}(t, \varepsilon) = \frac{t^2}{\varepsilon} \max_{k=1,2} \left\{ \mathcal{T}_{\bar{H}_k} \left(\frac{\varepsilon}{t}, \frac{\varepsilon^2}{t^2} \right) \right\} \quad (\text{B.6})$$

となる.

Corollary B.1 の証明— Lemma 2.1 の証明の結果を用いる．仮定より任意の $t > 0$, $\varepsilon' > 0$ に対して

$$\left\| \tilde{U}_{\bar{H}_1}(t, \varepsilon') - e^{\bar{H}_1 t} \right\| \leq \varepsilon', \quad \left\| \tilde{U}_{\bar{H}_2}(t, \varepsilon') - e^{\bar{H}_2 t} \right\| \leq \varepsilon' \quad (\text{B.7})$$

を満たす $\tilde{U}_{\bar{H}_2}(t, \varepsilon')$, $\tilde{U}_{\bar{H}_1}(t, \varepsilon')$ が実行可能であり,

$$\tilde{V}_n(t, \varepsilon') := (\tilde{U}_{\alpha_1 \bar{H}_1}(t/n, \varepsilon') \tilde{U}_{\alpha_2 \bar{H}_2}(t/n, \varepsilon'))^n, \quad \beta := \max\{\alpha_1, \alpha_2\} \quad (\text{B.8})$$

とすると式 (2.24) から $\|\tilde{V}_n(t) - e^{(\bar{H}_1 + \bar{H}_2)t}\| \leq 2n\varepsilon' + \mathcal{O}((\beta t)^2/n) = 2n\varepsilon' + \mathcal{O}(t^2/n)$ である．ここで $\beta = \mathcal{O}(1)$ であることを用いた．任意の $\varepsilon > 0$ に対して, ある定数 $C(\varepsilon), D(\varepsilon) \in \mathbb{R}$ を用いて

$$n = C(\varepsilon) \frac{t^2}{\varepsilon}, \quad \varepsilon' = \frac{1}{C(\varepsilon)D(\varepsilon)} \frac{\varepsilon^2}{t^2} \quad (\text{B.9})$$

とすると, $2n\varepsilon' + \mathcal{O}((\beta t)^2/n) < \varepsilon$ となる $\mathcal{O}(1)$ である $C(\varepsilon)$, $D(\varepsilon)$ が存在する, 従って, $\tilde{V}_n(t, \varepsilon')$ では $j = 1, 2$ に対して時間 $\mathcal{O}(T_{\alpha_j \bar{H}_j}(t/n, \varepsilon'))$ かかる操作をそれぞれ n 回使用するので式 (B.6) が確認される. \square

Corollary 3.1 の証明— 仮定より Trotter 分解を用いて $\bar{G}_2 := \alpha_1 \bar{H}_1 + \alpha_2 \bar{H}_2$ の τ -時間のダイナミクスの ε' 内の精度でシミュレートにかかる操作時間は Corollary B.1 より $\mathcal{T}_{\bar{G}_2}(\tau, \varepsilon') = \tau^2/\varepsilon \max_{j=1,2} \mathcal{T}_{\bar{H}_j}(\varepsilon'/\tau, (\varepsilon'/\tau)^2)$ となる．また, $\bar{G}_3 := \alpha_3 \bar{H}_3 + \bar{G}_2$ とすると,

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{\bar{G}_3}(\tau, \varepsilon') &= \frac{\tau^2}{\varepsilon'} \max_{\bar{h} \in \{\alpha_3 \bar{H}_3, \bar{G}_2\}} \left\{ \mathcal{T}_{\bar{h}} \left(\frac{\varepsilon'}{\tau}, \left(\frac{\varepsilon'}{\tau} \right)^2 \right) \right\}, \\ &= \frac{3\tau^2}{\varepsilon'} \max_{j \in [3]} \left\{ \mathcal{T}_{\alpha_j \bar{H}_j} \left(\frac{\varepsilon'}{\tau}, \left(\frac{\varepsilon'}{\tau} \right)^2 \right) \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

となる．ここで $\mathcal{T}_{\bar{G}_2}(\varepsilon'/\tau, (\varepsilon'/\tau)^2) = \mathcal{T}_{\bar{G}_2}(\tau, \varepsilon')$ となり, これを最大 $3\mathcal{O}(\tau^2/\varepsilon')$ 回操作することを用いた．同様にして, $\bar{G}_K = \alpha_K \bar{H}_K + \bar{G}_{K-1}$ にまで続けていくと, $\alpha_k = \mathcal{O}(1)$ ($k \in [K]$) に注意して

$$\mathcal{T}_{\bar{G}_K}(t, \varepsilon) = \frac{Kt^2}{\varepsilon} \max_{k \in [K]} \left\{ \mathcal{T}_{\bar{H}_k} \left(\frac{\varepsilon}{t}, \frac{\varepsilon^2}{t^2} \right) \right\} \quad (\text{B.11})$$

となり, 示せた. \square

Corollary 3.2 の証明— 仮定より任意の $t > 0$, $\varepsilon' > 0$ に対して

$$\left\| \tilde{U}_{\pm\bar{H}_1}(t, \varepsilon') - e^{\pm\bar{H}_1 t} \right\| < \varepsilon', \quad \left\| \tilde{U}_{\pm\bar{H}_1 t}(t, \varepsilon') - e^{\pm\bar{H}_2 t} \right\| < \varepsilon' \quad (\text{B.12})$$

が実行できる. Lemma 2.2 の証明より

$$\tilde{W}_n(t, \varepsilon') := \left(\tilde{U}_{-\bar{H}_1}(\sqrt{t/n}, \varepsilon') \tilde{U}_{-\bar{H}_2}(\sqrt{t/n}, \varepsilon') \tilde{U}_{\bar{H}_1}(\sqrt{t/n}, \varepsilon') \tilde{U}_{\bar{H}_2}(\sqrt{t/n}, \varepsilon') \right)^n \quad (\text{B.13})$$

を用いて $\|\tilde{W}_n(t) - e^{[\bar{H}_1, \bar{H}_2]t}\| = 4n\varepsilon' + \mathcal{O}((t^3/n)^{\frac{1}{2}})$ となる. 任意の $\varepsilon > 0$ に対して, ある定数 $C(\varepsilon), D(\varepsilon) \in \mathbb{R}$ を用いて

$$n = C(\varepsilon) \frac{t^3}{\varepsilon^2}, \quad \varepsilon' = \frac{1}{C(\varepsilon)D(\varepsilon)} \frac{\varepsilon^3}{t^3} \quad (\text{B.14})$$

とすると, $4n\varepsilon' + \mathcal{O}((t^3/n)^{\frac{1}{2}}) < \varepsilon$ となる $\mathcal{O}(1)$ である $C(\varepsilon), D(\varepsilon)$ が存在する, 従って, $\tilde{W}_n(t, \varepsilon')$ では $j = 1, 2$ に対して時間 $\mathcal{O}(\mathcal{T}_{\pm\bar{H}_j}(t/n, \varepsilon'))$ かかる操作をそれぞれ n 回使用するので式 (3.47) が確認される. \square

付録 C

数値解析の補足データ

C.1 最適化された制御パルスのデータ

ここでは第 3.2.1 項にある図 3.1 と図 3.3 を得るために行った, 100 回の GRAPE アルゴリズムの試行に得られた結果をそれぞれ表 C.1 と表 C.2 にすべて載せる.

C.2 Qutip のパッケージに入力した詳しい条件値

第 2.3.1 項の最後に GRAPE アルゴリズムの終了条件を述べたように, 予めこの条件を定めておく必要がある. ここでは第 3.2.2 項で実行した Procedure 3.1 の各ステップで適用した終了条件をまとめる.

本研究で, 最小時間の導出を数値解析に行う際に, Procedure 3.1 によって与えられた条件のもとで求めるロバスト制御パルスが得られたかどうかを判断した. 厳密には Procedure 3.1 に従って制御パルスの存在を示したわけではなく, Procedure 3.1 のステップ 2 では最適化を 25 回行い, ステップ 4, 6, 8 ではそれぞれ上位 6, 3, 2 個の制御パルスを取り出し, スロット数を増やした制御パルスを初期条件として解析を行った. この手順を Procedure 3.1' とすると, 実際に本研究で行った, 与えられた条件を満たした制御パルスの存在の有無の確認法は, Procedure 3.1' の 4 度の実行である. この方法であれば, 1 回目の Procedure 3.1' の第 9 ステップで目的の制御パルスを見つけることができれば Procedure 3.1 よりも時間的に効率的になる.

本解析では, 終了条件として第 2.3.1 項にある (3) のアルゴリズムの実行時間で終了することは無いように設定し, 基本的には (1) 目的の精度の達成と (2) のステップ数の上

限によって終了するようにした。そこで、目的の精度 E_{targ} は許容エラー値 ϵ に対して、 $E_{\text{targ}} = \epsilon/10$ を選んだ。また、ステップ数の上限は 1 回目の Procedure 3.1' では 700 とし、2, 3, 4 回目ではそれぞれ 800, 900, 1000 をインプットとして選んだ。

No.	エラー	No.	エラー	No.	エラー	No.	エラー
1	0.0001026	26	0.000164808	51	0.00019921	76	0.000253371
2	0.000105518	27	0.000165622	52	0.000199672	77	0.000254172
3	0.000106788	28	0.000167011	53	0.000205419	78	0.000258095
4	0.00010953	29	0.000167103	54	0.00020619	79	0.00027002
5	0.000110205	30	0.00016904	55	0.000206859	80	0.000277303
6	0.000115879	31	0.000171703	56	0.000209014	81	0.000279276
7	0.000134743	32	0.000173077	57	0.000209948	82	0.000283574
8	0.000136271	33	0.000173408	58	0.00021009	83	0.000291825
9	0.000142457	34	0.000176282	59	0.000211742	84	0.000297311
10	0.000144875	35	0.000178993	60	0.000214084	85	0.000298242
11	0.000149805	36	0.00017958	61	0.000216366	86	0.000303163
12	0.000149912	37	0.000179929	62	0.000217573	87	0.000304928
13	0.00015054	38	0.000181314	63	0.000220299	88	0.000305122
14	0.000157267	39	0.000182909	64	0.000221502	89	0.000312357
15	0.000157486	40	0.000183138	65	0.000223161	90	0.000313953
16	0.000157644	41	0.000184695	66	0.000224093	91	0.000328531
17	0.00015788	42	0.000187089	67	0.000226767	92	0.000332678
18	0.000158914	43	0.00018731	68	0.00023003	93	0.000347412
19	0.000159117	44	0.000187597	69	0.000230394	94	0.000352716
20	0.000159262	45	0.000189779	70	0.0002329	95	0.000362178
21	0.000160301	46	0.000190247	71	0.00023707	96	0.000363197
22	0.000162591	47	0.000193203	72	0.000239012	97	0.000364813
23	0.000163183	48	0.000193492	73	0.000240144	98	0.000366285
24	0.000163495	49	0.000194157	74	0.000246745	99	0.000401032
25	0.000163883	50	0.000197565	75	0.000248411	100	0.00043806

表 C.1 Example 3.1 の系に対して初期制御パルスをランダムに選んぴ GRAPE アルゴリズムによって 100 回の最適をした際のデータ. Ω_{11} の 11 点での平均エラーが小さい順に並べている. また各エラーは式 (3.62) で見積もられている.

No.	エラー	No.	エラー	No.	エラー	No.	エラー
1	0.000409439	26	0.000789389	51	0.000957072	76	0.001131079
2	0.000464477	27	0.000789443	52	0.000959653	77	0.00115733
3	0.000484401	28	0.000825444	53	0.000964302	78	0.001170934
4	0.000512892	29	0.000831723	54	0.000968521	79	0.001177856
5	0.00055938	30	0.000837273	55	0.000969675	80	0.001199802
6	0.00056477	31	0.000837398	56	0.000970433	81	0.001226552
7	0.000564829	32	0.000841441	57	0.000974861	82	0.001244505
8	0.00057479	33	0.000843318	58	0.000990656	83	0.001247112
9	0.000579227	34	0.000848462	59	0.000998991	84	0.001280256
10	0.000584315	35	0.000865366	60	0.001000868	85	0.001294017
11	0.000593079	36	0.000867676	61	0.001015955	86	0.001297218
12	0.00059897	37	0.000874818	62	0.001019862	87	0.001310078
13	0.000619038	38	0.000885622	63	0.001027665	88	0.001331083
14	0.000623155	39	0.000889106	64	0.001041782	89	0.001368891
15	0.000642434	40	0.000894553	65	0.001042724	90	0.001394692
16	0.000653902	41	0.000897043	66	0.001046269	91	0.001454705
17	0.000751135	42	0.000897419	67	0.00104804	92	0.001467234
18	0.000751332	43	0.000897625	68	0.001048723	93	0.001480212
19	0.000759661	44	0.000912942	69	0.001050773	94	0.001497713
20	0.000762769	45	0.000914832	70	0.001065776	95	0.001506325
21	0.000765884	46	0.000918966	71	0.001072954	96	0.001583086
22	0.000767691	47	0.000920909	72	0.001078861	97	0.001588242
23	0.000771189	48	0.000932142	73	0.001079324	98	0.001650574
24	0.000772862	49	0.000938874	74	0.001105517	99	0.001653173
25	0.000788138	50	0.000956122	75	0.001123648	100	0.002027609

表 C.2 Example 3.6 の系に対して初期制御パルスをランダムに選んぴ GRAPE アルゴリズムによって 100 回の最適をした際のデータ. Ω_{11} の 11 点での平均エラーが小さい順に並べている. また各エラーは式 (3.62) で見積もられている.