# Quantum Speed Limit for Quantum Natural Gradient Descent

かしゃるふぁ

2020 年 11 月 26 日

## 1 Quantum Speed Limit

ターゲットの量子系に付随したHilbert空間を$\mathcal{H}$で表し、その密度演算子全体のなすRiemann多様体を$\mathcal{S} := \mathcal{D}(\mathcal{H})$とする。このとき$\mathcal{S}$の計量テンソルを$g$とする(詳細は[1]を参照)。さらに$\mathcal{S}$の部分多様体$\mathcal{M}$を考える。$\mathcal{M}$に含まれる密度演算子は、パラメータ$\boldsymbol{\theta} \in \Theta \subset \mathbb{R}^m$を用いて$\rho(\boldsymbol{\theta})$と表されるとする。

以下では、パラメータ$\boldsymbol{\theta}$が時間$t \in [0, \tau]$に依存している場合を考える：$t \in [0, \tau] \to \boldsymbol{\theta}(t)$。このとき$\rho_t := \rho(\boldsymbol{\theta}(t))$が$\mathcal{M}$でなす曲線を$\gamma$と書く。つまり$\gamma := \{\rho_t : t \in [0, \tau]\}$である。以下では$\rho_t$は$t$について滑らかであるとする。 2つの量子状態$\rho_0$と$\rho_\tau$の間の計量テンソルを$g$による測地線距離を$\mathcal{D}(\rho_0, \rho_\tau)$として、曲線$\gamma$に沿った長さを$\mathcal{L}(\gamma)$とする。 $\mathcal{L}(\gamma)$は、

$$\mathcal{L}(\gamma) := \int_0^\tau dt \sqrt{\sum_{\mu,\nu} g_{\mu\nu}(\boldsymbol{\theta}_t) \frac{d\theta_\mu}{dt} \frac{d\theta_\nu}{dt}} \tag{1}$$

で定義されている。このとき測地線距離の定義から

$$\mathcal{D}(\rho_0, \rho_\tau) \leq \mathcal{L}(\gamma) \tag{2}$$

が成立している[1]。この不等式を量子速度限界(quantum speed limit)と呼ぶ。

## 2 Quantum Natural Gradient Descent

Riemann多様体$\mathcal{M}$上の滑かな関数$\mathcal{F}$についての最適化問題を考える。この最適化問題を解く手法の1つがQuantum Natural Gradient Descent [2]である。このノートでは簡単にするために、パラメータの更新を微小にしたQuantum Natural Gradient Descentを考える。つまりQuantum Natural Gradient Descentにおけるパラメータ$\boldsymbol{\theta}$の変化は、前節の設定と同様の滑らかな曲線となる。これを前節と同じ記号$\gamma$で表す。連続時間でのQuantum Natural Gradient Descentにおけるパラメータの変化則は

$$g(\boldsymbol{\theta}) \frac{d\boldsymbol{\theta}}{dt} = -\nabla \mathcal{F}(\boldsymbol{\theta}) \tag{3}$$

で与えられる。これは成分で表すと、

$$\sum_\nu g_{\mu\nu}(\boldsymbol{\theta}) \frac{d\theta_\nu}{dt} = -\partial_\mu \mathcal{F}(\boldsymbol{\theta}) \tag{4}$$

となる。この更新式を用いると$\mathcal{L}(\gamma)$は

$$\mathcal{L}(\gamma) = \int_0^\tau dt \sqrt{\sum_{\mu,\nu} g^{\mu\nu} (\partial_\mu \mathcal{L})(\partial_\nu \mathcal{L})} \tag{5}$$

となる。ここで$g^{\mu\nu}$は$g$の逆行列$g^{-1}$の$(\mu,\nu)$成分である。この式と量子速度限界(2)を組み合わせると

$$\mathcal{D}(\rho_0, \rho_\tau) \leq \int_0^\tau dt \sqrt{\sum_{\mu,\nu} g^{\mu\nu} (\partial_\mu \mathcal{L})(\partial_\nu \mathcal{L})} \tag{6}$$

が得られる。(6)式がQuantum Natural Gradient Descentに対して成り立つ量子速度限界であり、本ノートのメインの結果である。

残りの課題は、$g$と$\mathcal{L}$について具体的な形を代入して、(6)式から意味のある結果を得ることである。

### 2.1 ユニタリダイナミクスの場合

具体的なケースとして$\rho(\boldsymbol{\theta}) = U_{\boldsymbol{\theta}} \rho U_{\boldsymbol{\theta}}^\dagger$とユニタリ行列$U_{\boldsymbol{\theta}}$を用いて表されている場合を考える。ここで$U_{\boldsymbol{\theta}}$は生成子$\boldsymbol{X}$を使って$U_{\boldsymbol{\theta}} = e^{-i\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{X}}$と表せるとする。すると$iU_{\boldsymbol{\theta}}^\dagger \partial_\mu U_{\boldsymbol{\theta}} = X_\mu$が成り立つ。

#### 2.1.1 Quantum Fisher information metricの場合

計量テンソル$g$がquantum Fisher information metricの場合を考えよう。このとき

$$g_{\mu\nu}(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2} \sum_{j,l} \frac{(p_j - p_l)^2}{p_j + p_l} \langle j | \Delta X_\mu | l \rangle \langle l | \Delta X_\nu | j \rangle \tag{7}$$

が成り立つ[1]。ここで$\rho(\boldsymbol{\theta}) = \sum_j p_j |j\rangle \langle j|$と展開した。また$\Delta X_\mu \coloneqq X_\mu - \mathrm{tr}(X_\mu \rho(\boldsymbol{\theta}))$である。

## 参考文献


[1] Diego Paiva Pires et al., Generalized Geometric Quantum Speed Limits, Phys. Rev. X 6, 021031 (2016).

[2] James Stokes et al., Quantum natural gradient, Quantum 4, 269 (2020).