Vol.2022-QS-5 No.11
2022/3/24

パラメータ直交化法を用いたノイズのある量子振幅推定法

田中 智樹[1,2,3,a)]　宇野 隼平[1,4]　小野寺 民也[1,5]　山本 直樹[1,3]　鈴木 洋一[1]

概要：現在, 次世代のコンピュータとして, 量子コンピュータに注目が集まっている．それは従来のコンピュータと比べ, 計算量の優位性が示されているアルゴリズムを実行できるためであり, その一つに量子振幅推定法という, 従来のコンピュータを用いた場合に比べ, 振幅という値を 2 乗の計算量の優位性を持って推定できることが知られている．他方, 現在の量子コンピュータは, NISQ と呼ばれるように, 限られたリソースしかなく, 現在の量子コンピュータを使う上では, 特にノイズの影響を考慮に入れたアルゴリズムの構築が必要である．本稿では, ノイズのある量子コンピュータでの, 量子振幅推定法を実行する問題について議論する．量子コンピュータ自体で起こっているノイズを完璧に特定することは困難であるため, 何かしらのモデルを置き, 実験結果から推定を行うことをする．モデルの表現力をあげることで, より真のモデル分布に近づけることができるが, 一方で推定自体が難しくなるトレードオフがある．そこで, 本稿では, 脱分極ノイズモデルを拡張した形で, ノイズモデルを導入する．しかしながら, 拡張したモデルでは, ノイズに起因するパラメータが多すぎ, 推定ができないため, 同じようなノイズを受けると推定される補助回路を導入する．さらに, 補助回路を導入したモデルでは多次元のパラメータ推定問題, つまりは多次元の最適化問題を扱う必要が生じるが, これをパラメータ直交化法という手法を用いることで, 1 次元の最適化問題に帰着できるこを示す．特に, パラメータ直交化法を用いる条件式である微分方程式が解析的に解けることも述べる．最後に, シミュレーターおよび IBM の量子コンピュータでの検証を行う．

1. はじめに

現在，次世代のコンピュータとして，量子コンピュータに注目が集まっている．それは従来のコンピュータと比べ，計算量の優位性が示されているアルゴリズム [1], [2], [3] が知られており, その一つに量子振幅推定法 [4]（以下振幅推定法）がある．これは，従来のコンピュータを用いた場合に比べ, 振幅という値を 2 乗の計算量の優位性を持って推定できることが知られているアルゴリズムである．そして，このアルゴリズムは，モンテカルロ計算 [5], [6] や機械学習 [7], [8] 等，様々な応用が提案されている重要なアルゴリズムの一つである．この Brassard ら [4] によって提案された振幅推定法は，主に量子振幅増幅と，量子位相推定（逆量子フーリエ変換）という二つの部分から構成されており，十分なハードウェアがあるという前提に立ったアルゴリズムである．一方で, 現在の量子コンピュータは, Noisy Intermediate-Scale Quantum（NISQ）[9] と呼ばれるように, 量子ビットの数や計算可能な時間が限られており，更に，ノイズの影響を考慮に入れたアルゴリズムの構築が必要である．

そこで，直近，量子位相推定を用いない量子振幅推定法がいくつも提案されている [10], [11], [12], [13]．これらは，量子位相推定が不要となったことで，量子ビットの数を削減することができ，更に量子回路の深さを減らすことができることから，限られた計算時間でも計算できる可能性がある，より現在向けのアルゴリズムとなっている．続く [14] では，特に鈴木ら [10] の最尤推定を用いる振幅推定法を用いて，脱分極ノイズの影響を考慮に入れたアルゴリズムを構築している．ただし，このノイズの取り扱いについては非常に注意深く扱う必要がある．なぜならば，量子コンピュータ自体で起こっているノイズを完璧に特定することは困難であるためである．実際には, 何かしらのモデルを置き, 実験結果から推定を行うことをする．より，モデルの表現力をあげることで, より真のモデル分布に近づけることができるが, 一方で推定自体が難しくなるトレードオフがある．

1　慶應義塾大学 量子コンピューティングセンター
223-8522, 神奈川県横浜市港北区日吉 3-14-1
2　株式会社三菱 UFJ フィナンシャル・グループ，株式会社三菱 UFJ 銀行
100-8388 東京都千代田区丸の内 2-7-1
3　慶應義塾大学大学院 理工学研究科
223-8522, 神奈川県横浜市港北区日吉 3-14-1
4　みずほリサーチ&テクノロジーズ株式会社
101-8443 東京都千代田区神田錦町 2-3
5　日本アイ・ビー・エム株式会社
103-8510 東京都中央区日本橋箱崎町 19-21
a)　ttomoki@user.keio.ac.jp

そこで, 本稿では, 著者らによって [15] でも扱っているように，脱分極ノイズモデルを拡張した形で, ノイズモデルを導入し，振幅推定の問題を扱う．まず，2 章では，本稿で用いる主な手法の説明を，具体的には 2.1 節で最尤推定を用いた振幅指定法を，2.2 節では，パラメータ直交化法の説明を行う．そして，脱分極ノイズモデルを拡張したモデルを，3.1 節で行う．しかしながら, 拡張したモデルでは, ノイズに起因するパラメータが多すぎるため, 推定ができないため, 同じようなノイズを受けると推定される補助回路を導入する．この補助回路を導入したモデルによって，最尤推定を行うことで振幅を推定することができるが，この最尤推定は多次元となるため，つまりは多次元の最適化問題を扱う必要が生じる．多次元の最適化問題は一般に解くことが簡単ではないが，ここでは 2.2 節で紹介したパラメータ直交化法という手法を用いることで, 1 次元の最適化問題に帰着できることを 3.2 節で示す. 特に, パラメータ直交化法を用いる条件式である微分方程式が解析的に解けることも述べる. そして, 4 章では，シミュレーターおよび IBM の超電導量子コンピュータ実機 [16] での検証を行い，5 章でまとめを行う.

2. 準備

本章では，本稿で用いる最尤指定を用いた振幅推定法と，パラメータ直交化法について説明する.

2.1 最尤推定を用いた振幅推定法

本節では，最尤推定を用いた振幅推定法 [10] を説明する．まず，推定したいパラメータ $\theta \in [0, \pi/2]$ を振幅に埋め込む演算子 $\mathcal{A}$ を次の形で与える.

$$\mathcal{A}\left|0\right\rangle_{n+1} = \sin\theta\left|\tilde{\Psi}_1\right\rangle_n\left|1\right\rangle + \cos\theta\left|\tilde{\Psi}_0\right\rangle_n\left|0\right\rangle \tag{1}$$

ここで，$\left|0\right\rangle_{n+1} = \left|0\right\rangle^{\otimes n}$ であり，$\left|\tilde{\Psi}_1\right\rangle_n$ および $\left|\tilde{\Psi}_0\right\rangle_n$ は直交する n 量子ビットの状態である．そして，式 1 の状態を $\left|\Psi\right\rangle_{n+1}$ と置く，つまり，$\left|\Psi\right\rangle_{n+1} := \mathcal{A}\left|0\right\rangle_{n+1}$ である．そして，振幅増幅演算子（Grover 演算子）$\mathcal{G}$ を次で与える.

$$\mathcal{G} = -\mathcal{A}\mathcal{U}_0\mathcal{A}^\dagger\mathcal{U}_f \tag{2}$$

ただし，$\mathcal{U}_0$ と $\mathcal{U}_f$ は，次で定義される演算子である.

$$\begin{aligned}\mathcal{U}_0 &= I_{n+1} - 2\left|0\right\rangle_{n+1}\left\langle 0\right|_{n+1},\\ \mathcal{U}_f &= I_{n+1} - 2I_n \otimes \left|1\right\rangle\left\langle 1\right| = I_n \otimes \sigma_z.\end{aligned} \tag{3}$$

なお，I_n は恒等演算子である．さて，ここで任意の正の整数 m_k に対して，$\left|\Psi\right\rangle_{n+1}$ に振幅増幅演算子 $\mathcal{G}$ を m_k 回，作用させると，

$$\begin{aligned}\mathcal{G}^{m_k}\left|\Psi\right\rangle_{n+1} = &\sin((2m_k+1)\theta)\left|\tilde{\Psi}_1\right\rangle_n\left|1\right\rangle\\ &+ \cos((2m_k+1)\theta)\left|\tilde{\Psi}_0\right\rangle_n\left|0\right\rangle.\end{aligned} \tag{4}$$

となる．この状態において，最後の量子ビットが $\{\left|0\right\rangle, \left|1\right\rangle\}$ である測定基底で測定すると，“1” が得られる確率は，次で与えられる.

$$p_\theta^{(k)} = \mathbb{P}(\{h_k = 1\}) = \sin^2((2m_k+1)\theta) \tag{5}$$

なお，$h_k \in \{0,1\}$ は 2 変数の確率変数であり，そして，$\mathbf{h} = (h_1, \cdots, h_M) \in \{0,1\}^M$ とし，$\mathbf{h}$ に対する確率密度関数 $P(\mathbf{h};\theta)$ を次で置く.

$$P(\mathbf{h};\theta) = \prod_{k=1}^{M}(p_\theta^{(k)})^{h_k}(1-p_\theta^{(k)})^{1-h_k}. \tag{6}$$

更に，異なる m_k に対して，N_{shot} 回測定をした結果を $\mathbf{H} = \{\mathbf{h}^1, \cdots, \mathbf{h}^{N_{\mathrm{shot}}}\}$ とし，尤度関数 $L_G(\theta;\mathbf{H})$ を以下で定義をする.

$$L(\theta;\mathbf{H}) = \prod_{j=1}^{N_{\mathrm{shot}}} P(\mathbf{h}^j;\theta) \tag{7}$$

そして，最尤推定を用いて θ を推定することができる.

$$\hat{\theta}_{\mathrm{ML}} = \arg\max_\theta L(\theta;\mathbf{H}) = \arg\max_\theta \ln L(\theta;\mathbf{H}) \tag{8}$$

そして，Cramér–Rao の不等式を用いることで，θ の標準偏差 ϵ の下限を得ることができる．つまり，

$$\epsilon^2 = \mathbb{E}\big[(\theta-\hat{\theta})^2\big] \geq \frac{1}{N_{\mathrm{shot}}}J(\theta)^{-1} \tag{9}$$

が成り立つ．ここで，$J(\theta)$ は次で与えられる Fisher 情報量である.

$$J(\theta) = \mathbb{E}\Big[\Big(\frac{\partial}{\partial\theta}\ln P(\mathbf{h};\theta)\Big)^2\Big]. \tag{10}$$

なお，この下限は，漸近的に達成可能であることが知られている.

改めて, [10] によると, $m_k = k$ とした場合, $\epsilon = \mathcal{O}(\epsilon^{-4/3})$ となり，古典的な場合である $\mathcal{O}(\epsilon^{-2})$ より優位性がある．更に, $m_k = a^k$(a は 1 より大きな実数) とした場合, $\epsilon = \mathcal{O}(\epsilon^{-1})$ となり，これは Heisenberg 限界を達成する.

これまでのところでは，ノイズがない場合について議論を行った．しかしながら，現在の量子コンピュータはノイズがある．そこで，[14] では，ノイズがある場合の最尤推定を用いた振幅推定について，特に脱分極ノイズモデルを仮定して議論を行なっている．特に脱分極ノイズの大きさ κ(これは直接推定したいパラメータではなく，局外パラメータと呼ばれる) を用いて，モデルを構築すると，“1” が得られる確率 $p_{\theta,\kappa}^{(k)}$ は，次で示すことができる.

$$p_{\theta,\kappa}^{(k)} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\kappa m_k}\cos(2(2m_k+1)\theta) \tag{11}$$

本確率を用いてノイズがない場合と同様に $P(\mathbf{h};\theta,\kappa)$ および尤度関数 $L(\theta,\kappa;\mathbf{H})$ を構成することができ，2 次元の最尤推定を行うことで，推定したいパラメータ θ を得ること

ができる．ただし，ノイズ自体を完全に特定することは困難であるため，よりモデルを拡張することで，モデルの表現力をあげることを行いたい．そこで，複数の局外パラメータ $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \cdots, \beta_M)$ を持つモデルを考える．脱分極ノイズの場合と同様の議論を考えると，尤度関数 $L(\theta, \boldsymbol{\beta}; \mathbf{H})$ の最適化問題は，$M+1$ 次元のパラメータが存在することとなり，一般に簡単ではない．そこで，次の 2.2 節では，多次元の最適化問題を回避する一つの手法として，パラメータ直交化法を要約を行う．

2.2 パラメータ直交化法

本節では [17], [18] に基づき，パラメータ直交化法について要点を述べる．パラメータ直交化法とは，後に示す条件式となる微分方程式を満たすような変数変換を行うことで，推定したいパラメータ (parameter of interest) と局外パラメータ (nuisance parameter) を分離する方法である．この条件を満たすことができる場合，尤度方程式は 1 次元となり，1 次元の最適化問題を解くことで最尤推定が可能となる．

ここでは，確率 $p(x; \theta, \boldsymbol{\beta})$ について，特に，推定したいパラメータが θ の一つ，局外パラメータ $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \cdots, \beta_M)$ は，M 個ある場合を考える．そして，次を満たす変数変換を考える．

$$\theta = \theta(\xi_1) = \xi_1,\ \beta_k = \beta_k(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_{M+1}) \tag{12}$$

ここで，$\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_{M+1})$ は変数変換後のパラメータであり，$\boldsymbol{\xi}$ を用いたフィッシャー情報行列 $J_{\boldsymbol{\xi}}$ は，任意の $k = 2, 3, \cdots, M+1$ に対して次を満たす．

$$(J_{\boldsymbol{\xi}})_{1,k} = 0 \tag{13}$$

つまり，この式は変数変換後の Fisher 情報行列 (1,k) 成分がゼロとなることである．そして，この条件式は次の微分方程式を満たすことである．

$$J_{1,i} + \sum_{k=2}^{M+1} J_{i,k} \frac{\partial \beta_{k-1}}{\partial \xi_1} = 0 \tag{14}$$

注意すべきことに，この方程式の解はユニークに決まるものではない．改めて，パラメータ直交化法の狙いについて述べる．変数変換を行う上で満たす条件式 $(J_{\boldsymbol{\xi}})_{1,k} = 0$ は，次のように書き換えることができる．

$$\begin{aligned} 0 = (J_{\boldsymbol{\xi}})_{1,k} &= \mathbb{E}\Big[\frac{\partial \ln p(x; \boldsymbol{\xi})}{\partial \xi_1} \frac{\partial \ln p(x; \boldsymbol{\xi})}{\partial \xi_k}\Big] \\ &= -\mathbb{E}\Big[\frac{\partial^2}{\partial \xi_1 \partial \xi_k} \ln p(x; \boldsymbol{\xi})\Big] \\ &\approx -\frac{1}{N_x} \sum_g \frac{\partial^2}{\partial \xi_1 \partial \xi_k} \ln p(x_g; \boldsymbol{\xi}) \\ &= -\frac{1}{N_x} \frac{\partial^2}{\partial \xi_1 \partial \xi_k} \ln L(\boldsymbol{\xi}; \boldsymbol{x}) \end{aligned} \tag{15}$$

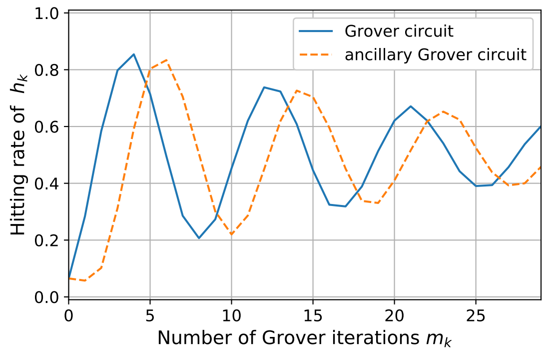


図 1 横軸に振幅増幅の回数 $m_k = k$ を取り，縦軸に最後の量子ビットが “1”である割合を示した実機の結果である．青色の実線が，通常の振幅増幅演算子によるものであり，橙色の破線が補助回路によるものである．なお，“ibm_kawasaki”の 1 番目と 4 番目の量子ビットを使ったものであり，各 m_k に対して，$N_{\mathrm{shot}} = 8192$ 回の測定を行なっている．

つまり，この式は，$(\partial/\partial\xi_1) \ln L(\boldsymbol{\xi}; \boldsymbol{x}) = 0$ を示している．すなわち，サンプル回数が大きい漸近的な極限では，θ の臨界点 (微分がゼロとなる点) が，ξ_k に依存しないことを示している．よって，$\theta = \xi$ の最尤推定に関しては，$\bar{\xi}_k\ \forall k \geq 2$ をラフに選び，1 次元の最適化問題 $\max_{\xi_1} \ln L(\xi_1, \bar{\xi}_2, \ldots, \bar{\xi}_{M+1}; \boldsymbol{x})$ を解けば良いことがわかる．最後に，θ に関する Cramér-Rao の下限である $(J^{-1})_{1,1}$ は，ξ に関する下限 $(J_\xi^{-1})_{1,1} = (J_\xi)_{1,1}^{-1}$ と同じになる．つまり，変数変換によって，達成可能な下限が変わっていないことを示している．

3. パラメータ直交化法を用いた振幅推定法

本章では，振幅推定法に，パラメータ直交化法の適用を行う．3.1 節ではモデルの拡張を行うとともに，補助回路の導入をし，3.2 節では実際にパラメータ直交化法を適用する．

3.1 補助回路

まず，IBM の量子コンピュータ [16] ibm_kawasaki で実際に振幅推定法を実行することを考える．ノイズがない理想的な量子コンピュータの場合，最後の量子ビットが 1 である確率は，式 (5) で示す通り，$p_\theta^{(k)} = \sin^2((2m_k+1)\theta)$ となる．一方で，現状の量子コンピュータはノイズがあり，実際に IBM の実機を用いた結果が図**図 1** の青い実線で示すものである．前節で述べた脱分極ノイズがある場合には，式 (11) の通り，

$$p_{\theta,\kappa}^{(k)} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \mathrm{e}^{-\kappa m_k} \cos(2(2m_k+1)\theta) \tag{16}$$

となる．しかしながら，実際の量子コンピュータでは，様々なノイズがあるため，より一般的なモデルである次の形に拡張する．

$$p_{\theta,\beta_k}^{(k)} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \beta_k \cos(2(2m_k+1)\theta) \tag{17}$$

これは脱分極ノイズを含む形であり，更に振幅増幅の回数 m_k に拠らないものである．そして，確率分布密度関数および尤度関数が次で与えられる．

$$
\begin{aligned}
P(\mathbf{h};\theta,\boldsymbol{\beta}) &= \prod_{k=1}^{M}[p_{\theta,\beta_k}^{(k)}]^{h_k}[1-p_{\theta,\beta_k}^{(k)}]^{1-h_k} \\
L(\theta,\boldsymbol{\beta};\mathbf{H}) &= \prod_{j=1}^{N_{\text{shot}}} P(\mathbf{h}^j;\theta,\boldsymbol{\beta})
\end{aligned}
\tag{18}
$$

なお，$\boldsymbol{\beta}=(\beta_1,\cdots,\beta_M)$ であり，$h_k,\mathbf{h},\mathbf{H}$ は前述と同じようものである．しかしながら，この場合，Fisher 情報行列が正則でなくなってしまうため，このままでは扱うことができない．

そこで，Fisher 情報行列の正則性の回復を行うために，別の補助回路の導入を行う．この回路は，元のものとは違う回路ながら，同じノイズを受けると想定されるものである．まず，“振幅増幅しない” 演算子 $\mathcal{R}$ を次の形で置く．

$$
\mathcal{R} := -\mathcal{A}U_0\mathcal{A}^\dagger I_{n+1}. \tag{19}
$$

これは，振幅増幅演算子 $\mathcal{G}=-\mathcal{A}\mathcal{U}_0\mathcal{A}^\dagger\mathcal{U}_f$ の $\mathcal{U}_f=I_n\otimes\sigma_z$ を恒等演算子に置き換えたものである．なお, 量子コンピュータの実機において，IBM の超電導量子コンピュータのように，Z 基底で測定している時，Z ゲートは，フレームチェンジによって実現されており，パルスの当たらない操作となっており [19]，これは NMR[20] やイオントラップ方式 [21] でも同様に実装されている．ここでは，演算子 G と R は同様のノイズを受けていると仮定して議論を進める．

そして，演算子 R を用いて，補助回路 $\mathcal{R}\mathcal{G}^{m_k-1}\left|\Psi\right\rangle_{n+1}$ を導入する．これは $\mathcal{G}^{m_k}$ の最後の演算子 $\mathcal{G}$ を $\mathcal{R}$ に置き換えたものであり，ノイズがない場合には，次のようになる．

$$
\begin{aligned}
\mathcal{R}\mathcal{G}^{m_k-1}\left|\Psi\right\rangle_{n+1} =&(-\mathcal{A}U_0\mathcal{A}^\dagger)(-\mathcal{A}\mathcal{U}_0\mathcal{A}^\dagger\mathcal{U}_f)\mathcal{G}^{m_k-2}\left|\Psi\right\rangle_{n+1} \\
=&\mathcal{U}_f\mathcal{G}^{m_k-2}\left|\Psi\right\rangle_{n+1}.
\end{aligned}
\tag{20}
$$

実際にはノイズがあり，(17) と同じノイズがあると仮定した場合の最後の量子ビットが “1”である確率 $q_{\theta,\beta_k}^{(k)}$ は,

$$
\begin{aligned}
q_{\theta,\beta_k}^{(k)} &= \frac{1}{2}-\frac{1}{2}\beta_k\cos(2(2(m_k-2)+1)\theta) \\
&= \frac{1}{2}-\frac{1}{2}\beta_k\cos(2(2m_k-3)\theta)
\end{aligned}
\tag{21}
$$

となる．つまり，これは振幅増幅の回数が 2 つ分遅れるモデルとなり，実際に実機を用いて結果が図 1 の橙色の破線であり，これは同様のノイズを受けるという仮定を支援する結果である．

そして，これらの確率を用いて，確率密度関数および尤度関数を以下で構成する．

$$
\begin{aligned}
Q(\boldsymbol{\ell};\theta,\boldsymbol{\beta}) &= \prod_{k=1}^{M}[q_{\theta,\beta_k}^{(k)}]^{\ell_k}[1-q_{\theta,\beta_k}^{(k)}]^{1-\ell_k} \\
L(\theta,\boldsymbol{\beta};\mathbf{H},\mathbf{L}) &= \prod_{i=1}^{N_{\text{shot}}} P(\mathbf{h}^i;\theta,\boldsymbol{\beta})\prod_{j=1}^{N'_{\text{shot}}} Q(\boldsymbol{\ell}^j;\theta,\boldsymbol{\beta})
\end{aligned}
\tag{22}
$$

なお，N'_{shots} は補助回路の測定回数である．また，$\mathbf{L}=\{\boldsymbol{\ell}^1,\cdots,\boldsymbol{\ell}^{N'_{\text{shots}}}\}$ であり，更に，$\boldsymbol{\ell}=(\ell_1,\cdots,\ell_M)$ であり，ℓ_k は $\mathcal{R}\mathcal{G}^{m_k-1}$ を一度だけ測定した結果である．これにより，対応する Fisher 情報行列は，逆行列を持つようになり，最尤推定を行えば，つまり，$\arg\max_{\theta,\boldsymbol{beta}} L(\theta,\boldsymbol{\beta};\mathbf{H},\mathbf{L})$ の最適化問題を解くことを行えば良い．しかしながら，これは $M+1$ 次元の最適化問題となるため，M が大きい時には一般的には簡単には解くことができない．そこで，次節でパラメータ直交化法を用いることで，1 次元の最適化問題に帰着できることを説明する．

3.2 パラメータ直交化法を用いた振幅推定法

前節で導入した式 (17) に対して，2.2 節で説明したパラメータ直交化法を用いる．つまり，式 (14) にある条件となる微分方程式を考える．なお，ここでは $N_{\text{shots}}=N'_{\text{shots}}$ とする．さて，条件式は任意の $k=1,\cdots,M$ に対して，$A_k^p(\xi_1)=\cos^2(2(2m_k+1)\xi_1)$, $A_k^q(\xi_1)=\cos^2(2(2m_k-3)\xi_1)$ とすると，以下のようになる．

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial\beta_k(\boldsymbol{\xi})}{\partial\xi_1}\left(\frac{A_k^p(\xi_1)}{1-A_k^p(\xi_1)\beta_k^2(\boldsymbol{\xi})}+\frac{A_k^q(\xi_1)}{1-A_k^q(\xi_1)\beta_k^2(\boldsymbol{\xi})}\right) \\
&=-\frac{\beta_k(\boldsymbol{\xi})}{2}\left(\frac{1}{1-A_k^p(\xi_1)\beta_k^2(\boldsymbol{\xi})}\frac{\partial A_k^p}{\partial\xi_1}+\frac{1}{1-A_k^q(\xi_1)\beta_k^2(\boldsymbol{\xi})}\frac{\partial A_k^q}{\partial\xi_1}\right)
\end{aligned}
\tag{23}
$$

すると，$\beta_k(\boldsymbol{\xi})$ は次を満たす.

$$
\{1-A_k^p(\xi_1)\beta_k^2(\boldsymbol{\xi})\}\{1-A_k^q(\xi_1)\beta_k^2(\boldsymbol{\xi})\}=c_k(\boldsymbol{\xi}') \tag{24}
$$

なお，c_k は局外パラメータ $\boldsymbol{\xi}'=(\xi_2,\cdots,\xi_{M+1})$ から生じる任意の関数である．そして，式 (24) は次のように解くことができる．

$$
\beta_k^2(\boldsymbol{\xi})=\frac{A_k^p+A_k^q\pm\sqrt{(A_k^p+A_k^q)^2-4A_k^pA_k^q(1-c_k(\boldsymbol{\xi}'))}}{2A_k^pA_k^q} \tag{25}
$$

更に $\beta_k(\boldsymbol{\xi})\geq$ であること等から，次の解を得ることができる．

$$
\beta_k(\boldsymbol{\xi})=\sqrt{\frac{A_k^p+A_k^q-\sqrt{(A_k^p+A_k^q)^2-4A_k^pA_k^q(1-c_k(\boldsymbol{\xi}'))}}{2A_k^pA_k^q}} \tag{26}
$$

2.2 節でも説明している通り，パラメータ直交化法を用いることで，測定回数の漸近的な極限において，$\theta=\xi_1$ の推定に関して，$c_k(\boldsymbol{\xi}')$ は影響を与えないことがわかる．それゆえに，$c_k(\boldsymbol{\xi}')$ はラフに選び，式 (22) で与えられている尤

度関数を，1 次元の関数に置き換えて，最尤推定することが可能となる．そして，この変数変換は解析的に解がもとまっていることから追加の計算量はほとんど必要ないことがわかる．つまり，条件式である微分方程式が解析的に解けていることが本質的に重要なことである．

4. デモンストレーション

4.1 節では数値シミュレーションを行い，4.2 節では実際に IBM の超電導量子コンピュータを用いて実験を行う．

4.1 数値シミュレーション

本節では数値シミュレーションを行う．具体的には，測定回数が有限の範囲でパラメータ直交化法が有効かを検証する．つまり，次の尤度方程式を考える．

$$\frac{\partial}{\partial\theta}\ln L(\theta,\boldsymbol{\beta};\mathbf{H},\mathbf{L})=0, \tag{27}$$

ここで，$\beta_k(\boldsymbol{\xi})$ は，式 (26) で得られるものである．実際に量子コンピュータを用いて計算を行う場合においても，測定回数は出来るだけ小さい方がよく，この解析は重要である．

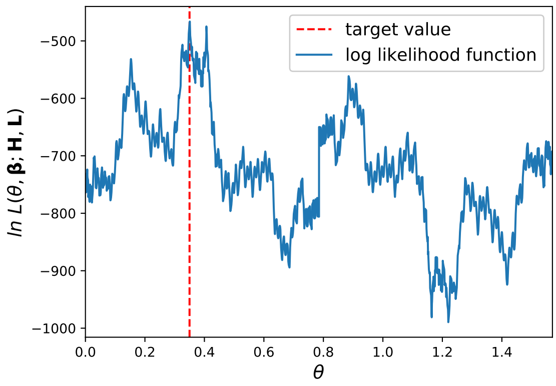
数値シミュレーションのパラメータは次のようにする．求める値である $\theta_*=0.35$ とし，測定回数は振幅増幅の回路 $\mathcal{G}^{m_k}\left|\Psi\right\rangle_{n+1}$ および，補助回路 $\mathcal{R}\mathcal{G}^{m_k-1}\left|\Psi\right\rangle_{n+1}$ ともに，$N_{\mathrm{shot}}=N'_{\mathrm{shot}}=50$ とする．そして，振幅増幅の回数 m_k は 2^{k-1} $(k=1,2,\ldots,8)$ とし，真の確率分布は，式 (11) における $\kappa=0.01$ としたものである．なお，式 (24) にある $\{c_1,\ldots,c_8\}$ は次の場合の 2 通りを考える．

1 : $\{0.844, 0.134, 0.956, 0.238, 0.236, 0.623, 0.793, 0.324\}$

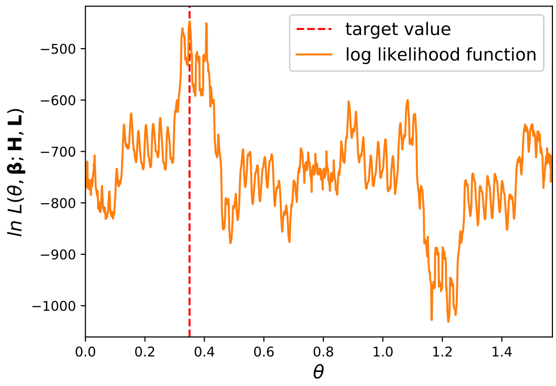
2 : $\{0.571, 0.452, 0.475, 0.259, 0.107, 0.965, 0.362, 0.522\}$

図 2(a) および (b) は，それぞれケース *1*, *2* の対数尤度関数である式 (27) の形状を青色および橙色の実線で示し，求める値である $\theta_*=0.35$ を赤の破線で示している．これらの図から，式 (22) の解である対数尤度の最大値は，推定したい値の近い値であることがわかる．つまり，$\{c_k\}$ の値に依存せず，1 次元の最適化問題を解くことで良いことを示している．更に，この尤度関数の形状は非常に複雑な形であることもわかり，これは最尤推定がうまくいかない可能性があることを示している．だからこそ，パラメータ直交化法を用いることで，この多次元の最適化問題を扱わなくてよくなる．

そして，最大値以外の $L(\boldsymbol{\xi};\mathbf{H},\mathbf{L})$ の局値，つまり，式 (27) の解は，ほぼ $\{c_k\}$ に依存しないことが，図 3 からわかる．図 3 は，$\theta=0.35$ 付近のケース *1*, *2* の場合，つまり，図 2 の拡大図を重ねたものである．この図 3 から，対数尤度関数の形は，$\{c_k\}$ の値によって変わることを示している．更に，注目すべきことは，局値の位置がケース *1* とケース *2* で，近いことである．測定回数 N_{shot} が小さいため，若干



(a) ケース *1*



(b) ケース *2*

図 2 青色および橙色の実線は，式 (22) にある対数尤度関数を，赤色の破線は推定したい値 $\theta_*=0.35$ を示している．

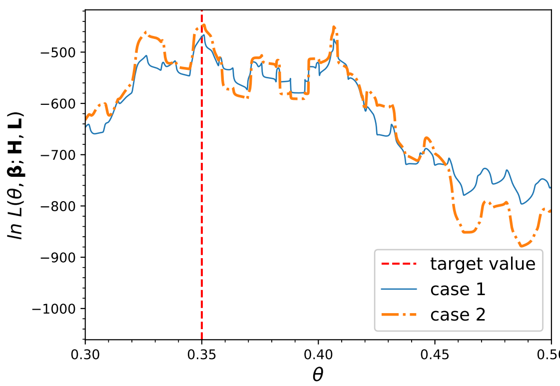


図 3 図 2(a),(b) の真の値 0.35 周辺の拡大図である．

の差はあるものの，理論から予測されるように，N_{shot} を大きくすると，差は小さくなることが確認している．

次に，パラメータ直交化法を用いた場合の，振幅推定法の推定精度について議論を行う．パラメータについては，$\{c_k\}$ の値以外，直前の場合と同じものを用いる．図 4 では，横軸に演算子 A の呼び出し回数 $N_q=\Sigma_{k=1}^{M}N_{\mathrm{shot}}(2m_k+1)$ を取り，縦軸に推定精度を示したものである．赤色の細い実線，橙色の太い実線はそれぞれ，ノイズがない場合の古典的なランダムサンプリング（つまり $m_k=0$ の時）と，量子振幅推定法を用いた場合の，Cramér–Rao の下限である．

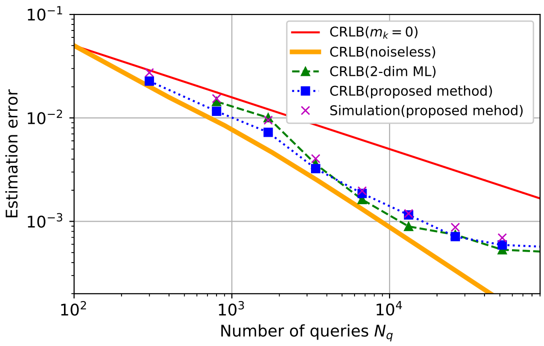


図 4 θ の推定精度と，演算子 A の総呼び出し回数 N_q の関係を示す．赤色の細い実線と，橙色の太い実線は，ノイズのない Cramér–Rao の下限であり，それぞれ古典的な場合と，量子的な場合を示している．緑色の破線と，青色の点線は，それぞれ，二次元の最尤推定を用いる手法と，パラメータ直交化法を用いた場合の Cramér–Rao の下限である．なお，脱分極ノイズモデルを仮定している．そして紫色のバツ点は，真の値 $\theta_* = 0.35$ と本章での手法を用いて数値シミュレーション計算された値 θ との標準誤差を示している．

この二つを比べると，後者の方が二乗での早く誤差が減少することが確認でき，量子振幅推定法の優位性がわかる．そして，三角点のある緑色の破線と四角点のある青色の点線は，それぞれ脱分極ノイズを仮定した際の，二次元の最尤指定を用いた場合と，本章で議論したパラメータ直交化法を用いた場合の Cramér–Rao の下限である．また，橙色の太い実線と，緑色の破線，青色の点線の三つの場合は，振幅増幅の回数は $m_k = 2^{k-1}$ としており，前者の二つの場合では測定回数を $N_{\text{shot}} = 100$ とし，後者の場合では振幅増幅の回路および補助回路の両方の測定回数 $N_{\text{shot}} = N'_{\text{shot}} = 50$ とすることで，各 m_k について，100 回の測定を行なうようにしている．なお，青色の破線の場合，Fisher 情報行列の逆行列の (1,1) 成分を計算しているが，これはパラメータ直交化法を用いた前後で変化しないことに注意する．そして，紫色のバツ点は，パラメータ直交化法を用いた振幅推定法を用いてシミュレーションを行なったものであり，真の値 $\theta_* = 0.35$ と推定した値 θ の分散を表している．なお，すべての k に対して $c_k = 0.3$ としている．

まず，脱分極ノイズモデルを仮定した 2 次元の最尤推定を用いた緑色の破線と，パラメータ直交化法を用いた場合の青色の点線は，非常に近いことがわかる．この結果は，真の分布が脱分極ノイズだけからなることから，本稿で議論した，パラメータを増やしたモデルが真のモデルを正しく捉えることをできていることを示している．次に，緑色の破線と青色の点線は，赤色の細い実線，つまり古典的な場合より良い精度出せる領域がある．つまり，ノイズがあったとしても量子振幅推定法の優位性が得られることを示している．そして，紫色のバツ点，すなわちシミュレーションの結果が Cramér–Rao の下限，つまり理論的な下限である青色の点線にほぼ一致していることである．これは，パラメータ直交化法を用いた手法がうまく機能していることを示しており，多次元の，特に本シミュレーションでは 9 次元の最適化問題を，1 次元の最適化問題に帰着でき，うまく推定ができていることを示している．なお，図 2 で示した複雑な尤度関数の形は，9 次元の関数を最大化し，最尤推定を行うことが難しいことを示しており，9 次元の最適化を行なった場合には，シミュレーションの紫色のバツ点と，Cramér–Rao の下限である青色の点線の乖離が大きくなるものと推測される．

4.2 実機による実験

本節では，IBM の超電導量子コンピュータ “ibm_kawasaki” を用いて，パラメータ直交化法を用いた振幅推定法の実験を行う．そのために，[10], [14], [15], [22] にあるように，$S = \sum_{j=0}^{2^n-1} f(j)r(j)$ を振幅推定法を用いて計算する．そして，次に示す演算子 $\mathcal{A} = \mathcal{T}(\mathcal{P} \otimes I_1)$ で振幅に S を埋め込むことを考える．

$$
\begin{aligned}
\mathcal{A}\,|0\rangle_n\,|0\rangle &= \mathcal{T}\sum_j \sqrt{r(j)}\,|j\rangle_n\,|0\rangle \\
&= \sum_j \sqrt{r(j)}\,|j\rangle_n \left(\sqrt{f(j)}\,|1\rangle + \sqrt{1-f(j)}\,|0\rangle\right) \\
&= \sqrt{S}\,|\tilde{\Psi}_1\rangle\,|1\rangle + \sqrt{1-S}\,|\tilde{\Psi}_0\rangle\,|0\rangle
\end{aligned}
\tag{28}
$$

なお，$|\tilde{\Psi}_1\rangle = \sum_j \sqrt{r(j)f(j)/S}\,|j\rangle_n$ および，$|\tilde{\Psi}_0\rangle = \sum_j \sqrt{r(j)(1-f(j))/(1-S)}\,|j\rangle_n$ と置く．そして，式 (1) から，振幅推定により $S = \sin^2\theta$ で推定できる．本検証では，任意の j に対して，$f(j) = \sin^2(\pi j/10)$，$r(j) = 1/2^n$ とし，特に $n = 1$ のシンプルな場合を扱う．なお，$\mathcal{P}$ と $\mathcal{T}$ は，Hadamard ゲートと，制御された y 回転ゲートで実装することができる．推定したい値 $\theta = 0.175$ とし，つまり，$S = 3.03 \times 10^{-2}$ の計算を行う．

そして，振幅増幅の回数 $m_k = 2^{k-1}$, $(k = 1, 2, \ldots, 7)$ とし，局外パラメータ $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \ldots, \beta_7)$ を用いて，パラメータ直交化法を適用する．図 5 は，θ の推定精度と，演算子 A の総呼び出し回数 $N_q = \Sigma_{k=1}^{M} N_{\text{shot}}(2m_k + 1)$ の関係を示している．赤色の細い実線は，古典的なランダムサンプリング，つまり，$m_k = 0$ の時，橙色の太い実線は，ノイズがない場合の量子振幅推定法を用いた場合の，Cramér–Rao の下限であり，図 4 と同じものである．そして，青色のバツ点は，実機を用いた場合の，推定したい値である $\theta_* = 0.175$ と誤差を示している．なお，$c_k = 0.3$ とし，測定回数は，振幅増幅回路の場合と補助回路の場合の両方で，$N_{\text{shot}} = 50$ としている．更に，$N_{\text{rep}} = 2{,}119$ 回同じ実験を繰り返して実行し，標準誤差の 3 倍をエラーバーとして示しており，これらのパラメータを表 1 にまとめて示す．

この図 5 から $N_q = 3 \times 10^3$ の範囲では，定数倍のオー

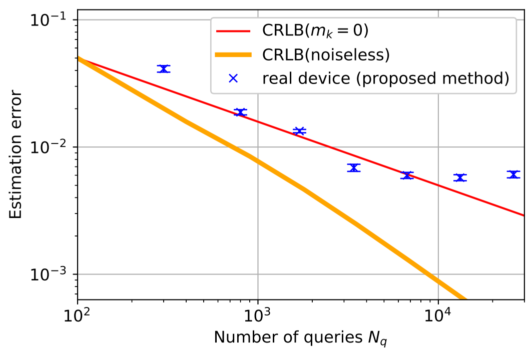


図 5 θ の推定精度と，演算子 A の総呼び出し回数 N_q の関係を示す．赤色の細い実線と，橙色の太い実線は，ノイズのない Cramér–Rao の下限であり，それぞれ古典的な場合と，量子的な場合を示している．青色のバツ点は，実機の結果であり，この手法を用いた際の推定精度の誤差を示している．

表 1 2 量子ビット (実機) を用いた際のパラメーター一覧

項目	文字	値
測定回数	$N_{\mathrm{shot}} = N'_{\mathrm{shot}}$	50
振幅増幅の回数	m_k	2^k
推定する値	θ	0.175
誤差を評価するための繰返回数	N_{rep}	2,119

バーヘッドはあるものの，N_q^{-1} に近い傾きを示していることがわかる．これは，前節の数値シミュレーションの場合で採用した $\kappa = 0.01$ よりも実機のノイズが大きく，実機の不確かさによるものと考えられる．それにもかかわらず，$N_q = 3 \times 10^3$ の付近の青色のバツ点では，古典的な場合の赤い細い実線より良い推定精度を得ている．ただし，振幅増幅の回数を増やしても，ノイズの影響により推定精度をより良くできないことがわかる．実際に，“ibm_kawasaki” から得られた本結果は，[14] で用いた “ibmq_valenica” と同程度のノイズの大きさであり，矛盾しない結果である．これらの結果は，多次元の最適化問題を解かずに，1 次元の最大化問題を解くことで，振幅推定法を実行でき，特定できないノイズ環境下でも機能することを示している．更に，脱分極ノイズモデルをより一般的なモデルに拡張することができることを示しており，更に，パラメータ直交化法を用いることで，θ の推定値は，局外パラメータ $\boldsymbol{\beta}$ によらず，そして，局外パラメータを推定せずに，ほぼ正確に計算できる可能性があることを示唆している．

5. まとめ

本稿では，パラメータ直交化法を用いた振幅推定法を説明した．より一般的なノイズモデルを導入することで，より未知のノイズを扱えるようにモデルの拡張を行うが，それにより推定が困難になることを，補助回路の導入によって解消し，更に多次元の最適化問題も，パラメータ直交化法を用いることで，1 次元の問題に帰着することをした．本直交化法を用いる際の一つの難しさは，条件となる微分方程式を解くことだが，これが解析的に解けていることも，本稿の貢献の一つである．

また，量子コンピュータを物理実験の装置としてみなすと，実験装置から必要な値を精密に得る必要があるが，一方で量子コンピュータはノイズ，特に未知のノイズがある状況下である．つまり，実験結果からそれらのノイズの効果をうまく処理する必要があり，そこには統計的な手法を用いることが有用である．これは，振幅推定の問題に限る話ではなく，例えばエラー訂正を考えた場合にも物理的な系ではノイズは存在するため，考えなければならない問題であり，重要な問題である．

謝辞 本稿は，文部科学省 Quantum Leap Flagship Program（JPMXS0118067285 および JPMXS0120319794）の支援を受け行われた．

参考文献

[1] David Deutsch and Richard Jozsa. Rapid solution of problems by quantum computation. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences*, Vol. 439, No. 1907, pp. 553–558, 1992.
[2] Peter W Shor. Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer. *SIAM review*, Vol. 41, No. 2, pp. 303–332, 1999.
[3] Lov K Grover. A fast quantum mechanical algorithm for database search. In *Proceedings of the twenty-eighth annual ACM symposium on Theory of computing*, pp. 212–219, 1996.
[4] Gilles Brassard, Peter Hoyer, Michele Mosca, and Alain Tapp. Quantum amplitude amplification and estimation. *Contemporary Mathematics*, Vol. 305, pp. 53–74, 2002.
[5] Ashley Montanaro. Quantum speedup of Monte Carlo methods. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, Vol. 471, No. 2181, p. 20150301, 2015.
[6] Patrick Rebentrost, Brajesh Gupt, and Thomas R Bromley. Quantum computational finance: Monte Carlo pricing of financial derivatives. *Physical Review A*, Vol. 98, No. 2, p. 022321, 2018.
[7] Anupam Prakash. *Quantum algorithms for linear algebra and machine learning.* PhD thesis, UC Berkeley, 2014.
[8] Nathan Wiebe, Ashish Kapoor, and Krysta M. Svore. Quantum algorithms for nearest-neighbor methods for supervised and unsupervised learning. *Quantum Inf. Comput.*, Vol. 15, pp. 316–356, 2015.
[9] John Preskill. Quantum computing in the nisq era and beyond. *Quantum*, Vol. 2, p. 79, 2018.
[10] Yohichi Suzuki, Shumpei Uno, Rudy Raymond, Tomoki Tanaka, Tamiya Onodera, and Naoki Yamamoto. Amplitude estimation without phase estimation. *Quantum Information Processing*, Vol. 19, No. 2, p. 75, 2020.
[11] Scott Aaronson and Patrick Rall. Quantum approximate counting, simplified, in Symposium on Simplicity in Algorithms. pp. 24–32. SIAM, 2020.
[12] Dmitry Grinko, Julien Gacon, Christa Zoufal, and Stefan Woerner. Iterative quantum amplitude estimation. *npj Quantum Information*, Vol. 7, No. 1, pp. 1–6, 2021.
[13] Kouhei Nakaji. Faster amplitude estimation. *Quantum*

Inf. Comput., Vol. 20, pp. 1109–1122, 2020.

[14] Tomoki Tanaka, Yohichi Suzuki, Shumpei Uno, Rudy Raymond, Tamiya Onodera, and Naoki Yamamoto. Amplitude estimation via maximum likelihood on noisy quantum computer. *Quantum Information Processing*, Vol. 20, No. 9, pp. 1–29, 2021.

[15] Tomoki Tanaka, Shumpei Uno, Tamiya Onodera, Naoki Yamamoto, and Yohichi Suzuki. Noisy quantum amplitude estimation without noise estimation. *Phys. Rev. A*, Vol. 105, p. 012411, 2022.

[16] IBM Quantum Experience. *https://quantum-computing.ibm.com*.

[17] David Roxbee Cox and Nancy Reid. Parameter orthogonality and approximate conditional inference. *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Methodological)*, Vol. 49, No. 1, pp. 1–18, 1987.

[18] Jun Suzuki. Nuisance parameter problem in quantum estimation theory: tradeoff relation and qubit examples. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, Vol. 53, No. 26, p. 264001, 2020.

[19] David C McKay, Christopher J Wood, Sarah Sheldon, Jerry M Chow, and Jay M Gambetta. Efficient z gates for quantum computing. *Physical Review A*, Vol. 96, No. 2, p. 022330, 2017.

[20] Emanuel Knill, R Laflamme, R Martinez, and C-H Tseng. An algorithmic benchmark for quantum information processing. *Nature*, Vol. 404, No. 6776, pp. 368–370, 2000.

[21] Emanuel Knill, Dietrich Leibfried, Rolf Reichle, Joe Britton, R Brad Blakestad, John D Jost, Chris Langer, Roee Ozeri, Signe Seidelin, and David J Wineland. Randomized benchmarking of quantum gates. *Physical Review A*, Vol. 77, No. 1, p. 012307, 2008.

[22] Tomoki Tanaka, Shumpei Uno, Yohichi Suzuki, and Rudy Raymond. https://github.com/Qiskit/qiskit-community-tutorials/blob/master/algorithms/SimpleIntegral_AEwoPE.ipynb, 2019. Accessed: 2021-10-01.