変分量子アルゴリズムに基づくポアソン方程式の求解

佐藤 勇気 $^{1,a)}$ 近藤 瑠 1 小出 智 1 梶田 晴司 1 高松 英紀 2 井元 信之 3

概要:近年のモノづくりは、物理現象の数値シミュレーションを活用しており、数値シミュレーションは、対象とする物理現象を記述する偏微分方程式を解く問題に帰着する.数値シミュレーションの大規模化および高速化のためには、偏微分方程式を省メモリで高速に解く手法が必要である.本研究では、最も基礎的な偏微分方程式であるポアソン方程式を対象とし、変分量子アルゴリズムに基づく偏微分方程式の数値解法において課題となっている勾配消失問題について議論する.変分量子アルゴリズムの目的関数の勾配が、パラメトライズした量子状態とポアソン方程式の入力項の内積で括れることを示し、数値実験により、その内積が1となるようにパラメータの初期値を設定することで最適化初期における勾配消失を回避できることを確認した.

Solving the Poisson equation based on variational quantum algorithms

Abstract: Recently, product development processes often employ numerical simulations of physical phenomena, which is performed by solving the partial differential equation (PDE) describing the physical phenomena. Thus, a technique to solve PDEs as quickly as possible with less memory is necessary to reduce the time required to perform numerical simulations, increasing their scales. The present study focuses on the Poisson equation which is the most fundamental PDE, and discusses the vanishing gradient problem, which is known as the common problems in the variational quantum algorithms. Several numerical experiments showed that the vanishing gradient can be avoided at the early stage of optimization, without decreasing the accuracy of the solutions, by setting the initial parameters of a parametrized quantum circuit so that the fidelity of a parametrized quantum state and the input of the Poisson equation could be 1.

1. はじめに

近年のモノづくりは数値シミュレーションが用いられており、数値シミュレーションのためには、物理現象を記述する偏微分方程式を解く必要がある。したがって、数値シミュレーションの高速化・大規模化のためには、いかに大規模なモデルに対して偏微分方程式を高速に解くことができるかが重要となる。大規模なモデルの数値シミュレーションを実行するためにスーパーコンピュータを用いた例は数多く報告されているが[1],[2],従来のコンピュータでは現実的な計算時間で実行できる規模に限界がある。そこで、本研究では、従来のコンピュータよりも格段に高速な計算が可能と期待される量子コンピュータに注目する。

- 1 株式会社豊田中央研究所
- 41-1, Yokomichi, Nagakute, Aichi 480–1192, Japan
- 2 トヨタ自動車株式会社
- 1 Toyota-Cho, Toyota, Aichi 471-8571, Japan
- 3 東京大学フォトンサイエンス研究機構
- 7-3-1, Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-0033, Japan
- a) yuki-sato@mosk.tytlabs.co.jp

量子コンピュータの特徴は、量子重ね合わせ状態のエン タングルメントと干渉効果を利用できることであり、近年 ハードウェアの開発が目覚ましく進められている. 量子コ ンピュータのソフトウェア面の研究も活発に行われており, 量子コンピュータの特徴を有効活用した量子アルゴリズム が数多く提案されている [3], [4]. 偏微分方程式を数値的に 解くには、一般的に、偏微分方程式を離散化して得られる連 立方程式を解く必要があるため、量子コンピュータにより 連立方程式を解くことができれば、量子コンピュータを用い た数値シミュレーションが可能となる. 連立方程式を解く ための量子アルゴリズムもいくつかすでに提案されており, 量子コンピュータのみで計算する方法 [5], [6], [7] や, 古典 計算とのハイブリッドで計算する方法 [8], [9], [10] がある. 後者のハイブリッド型のアルゴリズムは変分量子アルゴリ ズム (Variational quantum algorithm; VQA)[4] に基づく ものであり、NISQ (Noisy intermediate-scale quantum) を はじめとする比較的近い将来に実現されると言われている 量子コンピュータに実装できることが期待されている. 本

情報処理学会研究報告

IPSJ SIG Technical Report

稿では、先行研究 [10] に基づき、比較的単純な偏微分方程式であるポアソン方程式を対象とした変分量子アルゴリズムについて説明するとともに、その課題である勾配消失問題と、パラメトライズド量子回路(ansatz)の初期値の設定について議論する.

2. 手法

2.1 定式化

ある領域 Ω において成り立つポアソン方程式を考える. ポアソン方程式により支配される場を u, 空間座標を x とすると, ポアソン方程式は次のように表される.

$$-\nabla^2 u(\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}) \quad \text{in} \quad \Omega \tag{1}$$

ここで、f(x) は場に対する入力を表す量であり、例えば、u(x) を温度とみなしたとき、f(x) は発熱量となる. ポアソン方程式 (1) を離散化すると、次の連立方程式に帰着する.

$$A|u\rangle = |f\rangle \tag{2}$$

ここで、A は正定値対称な係数行列、 $|u\rangle$ 、 $|f\rangle$ はそれぞれ空間を離散化した節点上でのu、f の値を節点番号順に並べたベクトルである.式(2) の線形性から、一般性を失うことなく右辺ベクトル $|f\rangle$ の L_2 ノルムは1 であるとみなせるため、 $|f\rangle$ は量子状態とみなせる。一方で、 $|u\rangle$ の L_2 ノルムは1 ではないため、 $|u\rangle$ はこのままでは量子状態ではないことを注記しておく。

式 (2) を変分量子アルゴリズムの枠組みで解くために、 任意のベクトル $|v\rangle$ に関する次のエネルギー量を導入する.

$$E := \frac{1}{2} \langle v \, | \, A \, | \, v \rangle - \sqrt{\langle v \, | f \rangle \, \langle f | \, v \rangle} \tag{3}$$

このエネルギーを $|v\rangle$ に関して最小化すると、停留点において、

$$A|v\rangle - \frac{\langle f|v\rangle}{|\langle f|v\rangle|}|f\rangle = 0 \tag{4}$$

が成り立つ. すなわち, $|v\rangle$ はグローバル位相を除いて,式 (2) の解 $|u\rangle$ に一致する. なお, グローバル位相も含めて $|u\rangle$ を得るためには, 先行研究 [10] の定式化のように,エネルギー量を

$$E := \frac{1}{2} \langle v \mid A \mid v \rangle - \frac{1}{2} \left(\langle v \mid f \rangle + \langle f \mid v \rangle \right) \tag{5}$$

と定義すれば良い. ただし、この場合は $|f\rangle$ と $|u\rangle$ がエンタングルした状態

$$|f,u\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle |f\rangle + |1\rangle |u\rangle)$$
 (6)

を扱う必要がある. このエンタングルメントにより $|f\rangle$ と $|u\rangle$ の位相差が固定される.

本研究では、より単純な量子状態で扱える式(3)を考

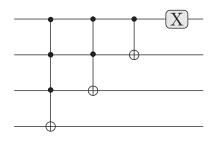


図 1 シフトオペレータの量子回路(4 量子ビットの場合).

Fig. 1 Quantum circuit of the shift operator.

える. 式 (3) を $|v\rangle$ に関して最小化するため, $|v\rangle$ をパラメータを用いて表現する.パラメータ θ によりパラメトライズされた量子状態 $|\psi(\theta)\rangle$ とパラメータ $r\in\mathbb{R}$ を導入し, $|v\rangle:=r|\psi(\theta)\rangle$ とする.このとき,式 (3) は次のようになる.

$$E = \frac{1}{2} r^2 \langle \psi(\boldsymbol{\theta}) | A | \psi(\boldsymbol{\theta}) \rangle - r \sqrt{\langle \psi(\boldsymbol{\theta}) | f \rangle \langle f | \psi(\boldsymbol{\theta}) \rangle}$$
 (7)

E の r に関する最小化は解析的に解け、

$$r = \frac{\sqrt{\langle \psi(\boldsymbol{\theta}) | f \rangle \langle f | \psi(\boldsymbol{\theta}) \rangle}}{\langle \psi(\boldsymbol{\theta}) | A | \psi(\boldsymbol{\theta}) \rangle}$$
(8)

のとき,

$$\min_{r} E = -\frac{1}{2} \frac{\langle \psi(\boldsymbol{\theta}) | f \rangle \langle f | \psi(\boldsymbol{\theta}) \rangle}{\langle \psi(\boldsymbol{\theta}) | A | \psi(\boldsymbol{\theta}) \rangle}$$
(9)

となる. したがって,式 (9) を θ に関して最小化すれば良い. 以上より、次の最適化問題が得られる.

$$\min_{\boldsymbol{\theta}} \quad -\frac{1}{2} \frac{\langle \psi(\boldsymbol{\theta}) | f \rangle \langle f | \psi(\boldsymbol{\theta}) \rangle}{\langle \psi(\boldsymbol{\theta}) | A | \psi(\boldsymbol{\theta}) \rangle}$$
(10)

この最適化問題の解を θ^* とすると, $|u\rangle$ の近似解は次のように表せる.

$$|u\rangle \approx \frac{\sqrt{\langle \psi(\boldsymbol{\theta}^*) |f\rangle \langle f| \psi(\boldsymbol{\theta}^*)\rangle}}{\langle \psi(\boldsymbol{\theta}^*) |A| \psi(\boldsymbol{\theta}^*)\rangle} |\psi(\boldsymbol{\theta}^*)\rangle$$
 (11)

ただし、前述の通り $|u\rangle$ と $|\psi(\boldsymbol{\theta})\rangle$ のグローバル位相は必ずしも一致しないことを注記しておく.

2.2 期待値評価

式 (10) の目的関数を量子コンピュータを用いて評価するためには、期待値 $\langle \psi(\boldsymbol{\theta}) | A | \psi(\boldsymbol{\theta}) \rangle$ と $\langle \psi(\boldsymbol{\theta}) | f \rangle \langle f | \psi(\boldsymbol{\theta}) \rangle$ の評価が必要である.ここでは,それぞれの期待値評価の方法について述べる.

2.2.1 $\langle \psi(heta) \, | \, A \, | \, \psi(heta) angle$ の評価

1 次元ポアソン方程式を長さ 1 で等間隔に配置した節点で有限差分法により離散化すると,係数行列 $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ は次のようになる.

IPSJ SIG Technical Report

$$A := \begin{bmatrix} 1 + \alpha + \beta_0 & -1 & 0 & \dots & 0 & -\alpha \\ -1 & 2 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & & \dots & 2 & -1 \\ -\alpha & 0 & & \dots & -1 & 1 + \alpha + \beta_{N-1} \end{bmatrix}$$

$$(12)$$

ここで、N は全節点数であり、 α 、 β_0 、 β_{N-1} は端点の境界条件に応じて次のように決められる.

$$\alpha = \begin{cases} 1 & \text{for periodic boundary condition} \\ 0 & \text{otherwise (Dirichlet/Neumann)} \end{cases}$$
 (13)

$$\beta_{j} = \begin{cases} 1 & \text{for Dirichlet boundary condition} \\ & \text{on } j\text{-th node } (j = 0 \text{ or } N - 1) \\ 0 & \text{otherwise (periodic/Neumann)} \end{cases}$$
 (14)

 $N=2^n$ と仮定し、行列 A の規則性に着目すると、A は次のように $\mathcal{O}(1)$ の項に分解できる.

$$A = I^{\otimes n-1} \otimes (I - X) + P^{\dagger} (I^{\otimes n-1} \otimes (I - X)) P$$

$$- (1 - \alpha) P^{\dagger} \left(|0\rangle \langle 0|^{\otimes n-1} \otimes ((1 - \beta_N) |0\rangle \langle 0| \right) P$$

$$- (1 - \alpha) P^{\dagger} \left(|0\rangle \langle 0|^{\otimes n-1} \otimes ((1 - \beta_0) |1\rangle \langle 1| \right) P$$

$$+ (1 - \alpha) P^{\dagger} \left(|0\rangle \langle 0|^{\otimes n-1} \otimes X \right) P$$

$$(15)$$

ここで、P はシフトオペレータであり、

$$P := \sum_{i=1}^{2^{n}-1} |i+1\rangle \langle i| \tag{16}$$

と定義される.ここで, $|2^n\rangle := |0\rangle$ とする.シフトオペレータの実装には multi-controlled Toffoli ゲートが必要であり (図 1),これを分解すると $\mathcal{O}(n^2)$ の CNOT ゲートが必要になる. $\mathcal{O}(n^2)$ の CNOT ゲートは,ノイズの観点から現状の量子コンピュータで扱うのが難しいため,シフトオペレータを用いるには,エラー低減,訂正技術の発展を待つか,シフトオペレータの効率的な実装方法の開発が課題となる.一方,ディリクレ型の境界条件($\alpha=0,\beta_0=1,\beta_N=1$)を対象とし, $\mathcal{O}(n)$ の CNOT ゲートで A の期待値を評価する方法 [9] や,それを任意の行列に拡張した方法 [11] も提案されている.これらの方法では,CNOT ゲートの数が $\mathcal{O}(n)$ になる代わりに,期待値評価が必要になる項の数が $\mathcal{O}(n)$ になる.

2.2.2 $\langle \psi(\theta) | f \rangle \langle f | \psi(\theta) \rangle$ の評価

あるユニタリ U_f により $|f\rangle = U_f |0\rangle^{\otimes n}$ が成り立つとすると、

$$\langle \psi(\boldsymbol{\theta}) | f \rangle \langle f | \psi(\boldsymbol{\theta}) \rangle = \left\langle \psi(\boldsymbol{\theta}) | U_f | 0 \rangle \langle 0 |^{\otimes n} U_f^{\dagger} | \psi(\boldsymbol{\theta}) \right\rangle$$
(17)

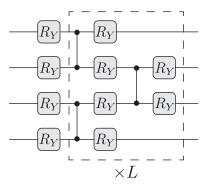


図 2 Ansatz の量子回路 (4 量子ビットの場合). *L* はレイヤー数を表す.

Fig. 2 Quantum circuit of the ansatz (for the case of 4 qubits). L is the number of layers.

とかける. したがって、期待値 $\langle \psi(\boldsymbol{\theta}) | f \rangle \langle f | \psi(\boldsymbol{\theta}) \rangle$ は、量子状態 $|\psi(\boldsymbol{\theta})\rangle$ に U_f^{\dagger} を作用させ、計算基底で測定したときに全てのビットが 0 になる確率として計算できる.

2.3 Ansatz とパラメータの初期化方法

本研究では、量子状態 $|\psi(\theta)\rangle$ の生成に alternating layered ansatz [12] を用いる. ansatz の量子回路を図 2 に示す.

alternating layered ansatz を用いた場合,式 (15) の第 2 項以降や,式 (17) の $|0\rangle\langle 0|^{\otimes n}$ のようなグローバルなオペレータに関しては,量子ビット数の増加に伴って,指数関数的に勾配消失することが知られている [12]. 本研究では,パラメータの初期値を指定することで,最適化初期における勾配消失を回避する方法を検討する.式 (10) において,A は正定値であるため,分母は必ず正になる.他方,分子は $|f\rangle$ と $|\psi(\theta)\rangle$ の fidelity であり,0 以上 1 以下の値をとる. $|\psi(\theta)\rangle$ をランダムに生成した場合,n が大きくなるにつれて $|f\rangle$ との fidelity は指数関数的に小さくなるため,式 (10) の目的関数はパラメータ空間のいたるところで 0 になり,勾配消失が生じる.実際,式 (10) の目的関数を J とおき,J のパラメータ微分を考えると、

$$\frac{\partial J}{\partial \theta_{i}} = -\frac{\operatorname{Re}\left[\left\langle \psi_{,i} \mid f \right\rangle \left\langle f \mid \psi \right\rangle\right]}{\left\langle \psi \mid A \mid \psi \right\rangle} + \frac{\left|\left\langle \psi \mid f \right\rangle\right|^{2} \operatorname{Re}\left[\left\langle \psi_{,i} \mid A \mid \psi \right\rangle\right]}{\left\langle \psi \mid A \mid \psi \right\rangle^{2}} \tag{18}$$

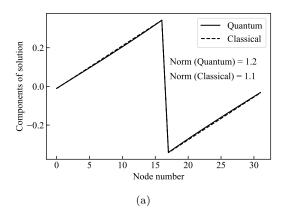
となり、内積 $\langle \psi \,|\, f \rangle$ が 0 のときに勾配が 0 になることがわかる.ここで, $|\psi_{,i}\rangle$ は量子状態 $|\psi(\pmb{\theta})\rangle$ を i 番目のパラメータ θ_i で微分した状態を表す.

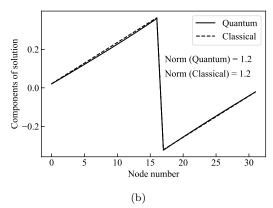
したがって、 $|f\rangle$ と $|\psi(\theta)\rangle$ の fidelity が正になるような初期値を設定できれば、少なくとも初期値においては勾配消失を回避できると考えられる。そこで、ansatz のパラメータ量子回路を U_{θ} として、本研究では、以下の 2 つのパラメータ量子状態 $|\psi_0(\theta)\rangle$ 、 $|\psi_f(\theta)\rangle$ を考える。

$$|\psi_{\text{random}}(\boldsymbol{\theta})\rangle = U_{\boldsymbol{\theta}} |0\rangle^{\otimes n}$$
 (19)

$$|\psi_{\text{deterministic}}(\boldsymbol{\theta})\rangle = U_{\boldsymbol{\theta}} |f\rangle$$
 (20)

IPSJ SIG Technical Report





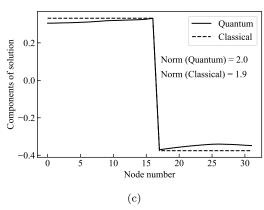


図 3 解の分布. quantum(実線) と classical(破線) のプロットは、 それぞれ VQA 解と古典計算により得られた ground truth を 表す. (a) 両端周期境界条件 ($\alpha=1,\beta_0=0,\beta_{N-1}=0$), (b) 両端ディリクレ境界条件 ($\alpha=0,\beta_0=1,\beta_{N-1}=1$), (c) 両 端ノイマン境界条件 ($\alpha=0,\beta_0=0,\beta_{N-1}=0$)

Fig. 3 Distribution of the solution. Plots of 'Quantum' (line) and 'Classical' (dashed line) respectively represent the results obtained by VQA and classical computing. (a) Periodic boundary conditions for both edges ($\alpha=1, \beta_0=0, \beta_{N-1}=0$), (b) Dirichlet boundary conditions for both edges ($\alpha=0, \beta_0=1, \beta_{N-1}=1$), (c) Neumann boundary conditions for both edges ($\alpha=0, \beta_0=0, \beta_{N-1}=0$).

式 (19) は一般的なパラメータ量子状態の生成方法であり、式 (19) を用いる際は、パラメータ θ の初期値をランダムに設定する.一方、式 (20) を用いる際は、レイヤー数 L を偶数に設定し、かつ $\theta=0$ とする.このとき、CZ ゲートが打

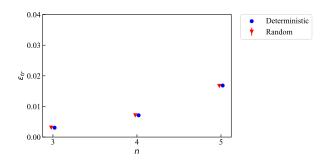


図 4 両端ディリクレ境界条件 $(\alpha=0,\beta_0=1,\beta_{N-1}=1)$ の場合 の groundtruth と VQA 解のトレース距離. random(赤) と deterministic(青) のプロットは、それぞれ式 (19) と (20) の 初期条件を用いた結果を表す.

Fig. 4 Plot of the trace distance between groundtruth and VQA-based solution v.s. the number of qubits — when the Dirichlet boundary condition is imposed on both edges ($\alpha=0,\beta_0=1,\beta_{N-1}=1$). Plots of 'Random' (red) and 'Deterministic' (blue) respectively represent the result based on the use of Eq. 19 and 20.

ち消し合って $U_{\theta}=I$ になるため、 $|\psi_{\text{deterministic}}(\mathbf{0})\rangle=|f\rangle$ となる。したがって、式 (20) を用いる場合、初期パラメータにおいて、必ず $|f\rangle$ と $|\psi_{\text{deterministic}}(\boldsymbol{\theta})\rangle$ の fidelity が 1 になる。この設定の有効性を、式 (19) を用いた場合の結果と比較することで検証する。

3. 結果

本研究では、Qiskit ver 0.27.0 を用いて量子回路を実装した。また、量子回路の実行には、Qiskit の state vector simulator を用いた。ansatz のレイヤー数は L=4 で固定し、パラメータの最適化には、BFGS を用いた。式 (19) を用いる場合は、 $\boldsymbol{\theta}$ の初期値を $[0,2\pi]$ の範囲でランダムに設定し、30 回計算を実行した。 $|f\rangle$ を生成するためのユニタリは、 $U_f=H_0X_0X_{n-1}$ とした。

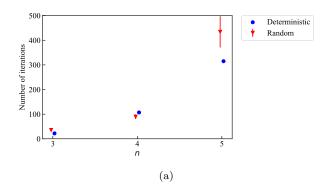
3.1 解の分布

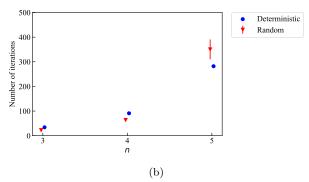
まず、(20) の初期条件を用いて得られた解と、古典計算により得られた ground truth の分布を図 3 に示す. いずれの境界条件においても、ground truth とよく一致する解が得られた.

3.2 トレース距離の比較

$$\varepsilon_{\rm tr} := \frac{1}{2} \operatorname{Tr} \left(\sqrt{\left(\left| \psi \right\rangle \left\langle \psi \right| - \left| \bar{u} \right\rangle \left\langle \bar{u} \right| \right)^2} \right) = \sqrt{1 - \left| \left\langle \psi \right| \bar{u} \right\rangle \right|^2}$$
(21)

IPSJ SIG Technical Report





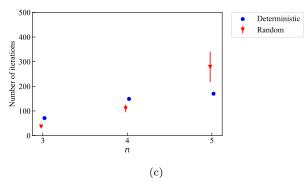


図 5 量子ビット数とパラメータ最適化の反復回数の関係、赤と青のプロットは、それぞれ式 (19) と (20) の初期条件を用いた結果を表す。 (a) 両端周期境界条件 ($\alpha=1,\beta_0=0,\beta_{N-1}=0$), (b) 両端ディリクレ境界条件 ($\alpha=0,\beta_0=1,\beta_{N-1}=1$), (c) 両端ノイマン境界条件 ($\alpha=0,\beta_0=0,\beta_{N-1}=0$)

Fig. 5 Plot of the the number of iterations v.s. the number of qubits. (a) Periodic boundary conditions for both edges ($\alpha=1,\beta_0=0,\beta_{N-1}=0$), (b) Dirichlet boundary conditions for both edges ($\alpha=0,\beta_0=1,\beta_{N-1}=1$), (c) Neumann boundary conditions for both edges ($\alpha=0,\beta_0=0,\beta_{N-1}=0$).

ここでは、両端がディリクレ境界条件の場合の結果を示した.青色のプロットが式 (20) を用いた場合、赤色のプロットが式 (19) を用いた場合の結果に対応する.赤色のプロットはランダムに初期値を設定して 30 回最適化を行った平均値を表しており、30 回ともほとんど同じ解が得られた.図 4 より、式 (19) および (20) のいずれにおいてもほとんど同じ精度で解を得られたことが確認できる.なお、両端周期境界条件および両端ノイマン境界条件の場合も同様の結果が得られた.

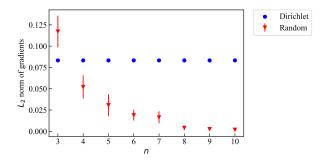


図 6 量子ビット数と勾配の L_2 ノルムの関係. 赤と青のプロットは、それぞれ式 (19) と (20) の初期条件を用いた結果を表す.

Fig. 6 Plot of the L_2 norm of the gradient v.s. the number of qubits

3.3 パラメータ最適化の反復回数の比較

次に、パラメータ最適化の反復回数という点で式 (19)、 (20) のそれぞれの設定を比較する. 図 5 に量子ビット数と 収束までに必要だった最適化の反復回数の関係を示す. 青色のプロットが式 (20) を用いた場合、赤色のプロットが式 (19) を用いた場合の結果を表す. 赤色のプロットが式 (19) を用いた場合の結果を表す. 赤色のプロットはランダムに初期値を設定して 30 回最適化を行った平均値を表しており、95%信頼区間をエラーバーで示した. 図より、いずれの境界条件においても、3 量子ビットと 4 量子ビットのときは、式 (19) においてランダムな初期値を設定した場合の方が必要な反復回数が少なくなっているが、5 量子ビットのときは、(20) を用いた場合の方が,式 (19) を用いた場合の 95%信頼区間よりも反復回数が少なくなっていることがわかる. したがって、大規模な問題においては、式 (20) を用いて初期パラメータを $\theta=0$ と設定した方が早く解が得られる可能性が高いといえる.

3.4 勾配の大きさの比較

最後に、量子ビット数と勾配の L_2 ノルムの関係を比較 する. 図6に、両端ディリクレ境界条件に設定した場合の 初期パラメータにおける勾配の L_2 ノルムを示す. 青色の プロットは式 (20) を、赤色のプロットは式 (19) を用いた 場合の勾配の L_2 ノルムを示している. 赤色のプロットは 30点のパラメータにおいて評価した勾配のノルムの平均値 を示しており、95%信頼区間をエラーバーで示した、図よ り、ランダムな初期パラメータを用いた場合は、勾配のノ ルムが指数関数的に 0 に収束している様子がわかる. 一方 で、式 (20) において $\theta = 0$ と設定した場合は、量子ビッ ト数に関わらず勾配のノルムが一定となっている.両端周 期境界条件の場合と両端ノイマン境界条件の場合において も、同様の傾向を示した. これは、2.3節で述べたように、 $|\psi(\boldsymbol{\theta})\rangle$ をランダムに生成した場合,式 (10) の目的関数はパ ラメータ空間のいたるところで 0 になり勾配消失が生じる のに対し、 $|\psi(\boldsymbol{\theta})\rangle = |f\rangle$ となるようなパラメータを設定す れば、fidelityが1になることが保証されるためであると考

情報処理学会研究報告

IPSJ SIG Technical Report

えられる. したがって、最適化の初期パラメータにおける 勾配を保証するには、本アプローチは有効であることがわ かった. しかしながら、最適化の過程における勾配の大き さは保証されていないことに注意が必要である.

4. おわりに

本稿では、ポアソン方程式を対象とした変分量子アルゴリズムについて説明するとともに、その課題である勾配消失問題と、パラメータ量子回路(ansatz)の初期値の設定について議論した。数値実験の結果、ansatz の初期状態を連立方程式の右辺ベクトルと一致させるように設定することで、解の精度を下げることなく最適化初期における勾配消失を回避できることを確認した。しかしながら、最適化の過程における勾配のノルムは保証されているわけではないため、最適化の過程における勾配消失に関する議論が今後の課題である。偏微分方程式を解くという問題の性質上、オブザーバブルをローカルな演算子のみで定義するのは困難であると思われるため、偏微分方程式の解法に適した ansatz の開発が課題である。

謝辞 本研究は, UTokyo Quantum Initiative の支援を 受けたものである.

参考文献

- Kato, C., Yamade, Y., Nagano, K., Kumahata, K., Minami, K. and Nishikawa, T.: Toward realization of numerical towing-tank tests by wall-resolved large eddy simulation based on 32 billion grid finite-element computation, SC20: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, IEEE, pp. 1–13 (2020).
- [2] Fujita, K., Koyama, K., Minami, K., Inoue, H., Nishizawa, S., Tsuji, M., Nishiki, T., Ichimura, T., Hori, M. and Maddegedara, L.: High-fidelity nonlinear loworder unstructured implicit finite-element seismic simulation of important structures by accelerated elementby-element method, *Journal of Computational Science*, Vol. 49, p. 101277 (2021).
- [3] Montanaro, A.: Quantum algorithms: an overview, npj Quantum Information, Vol. 2, No. 1, pp. 1–8 (2016).
- [4] Cerezo, M., Arrasmith, A., Babbush, R., Benjamin, S. C., Endo, S., Fujii, K., McClean, J. R., Mitarai, K., Yuan, X., Cincio, L. et al.: Variational quantum algorithms, *Nature Reviews Physics*, pp. 1–20 (2021).
- [5] Harrow, A. W., Hassidim, A. and Lloyd, S.: Quantum algorithm for linear systems of equations, *Physical Re*view Letters, Vol. 103, No. 15, p. 150502 (2009).
- [6] Childs, A. M., Kothari, R. and Somma, R. D.: Quantum algorithm for systems of linear equations with exponentially improved dependence on precision, SIAM Journal on Computing, Vol. 46, No. 6, pp. 1920–1950 (2017).
- [7] Cao, Y., Papageorgiou, A., Petras, I., Traub, J. and Kais, S.: Quantum algorithm and circuit design solving the Poisson equation, New Journal of Physics, Vol. 15, No. 1, p. 013021 (2013).
- [8] Bravo-Prieto, C., LaRose, R., Cerezo, M., Subasi, Y., Cincio, L. and Coles, P.: Variational quantum linear solver: A hybrid algorithm for linear systems, *Bulletin*

- of the American Physical Society, Vol. 65 (2020).
- [9] Liu, H.-L., Wu, Y.-S., Wan, L.-C., Pan, S.-J., Qin, S.-J., Gao, F. and Wen, Q.-Y.: Variational quantum algorithm for the Poisson equation, *Phys. Rev. A*, Vol. 104, p. 022418 (2021).
- [10] Sato, Y., Kondo, R., Koide, S., Takamatsu, H. and Imoto, N.: Variational quantum algorithm based on the minimum potential energy for solving the Poisson equation, *Physical Review A*, Vol. 104, p. 052409 (2021).
- [11] Kondo, R., Sato, Y., Koide, S., Kajita, S. and Takamatsu, H.: Computationally Efficient Quantum Expectation with Extended Bell Measurements, arXiv preprint arXiv:2110.09735 (2021).
- [12] Cerezo, M., Sone, A., Volkoff, T., Cincio, L. and Coles, P. J.: Cost function dependent barren plateaus in shallow parametrized quantum circuits, *Nature communica*tions, Vol. 12, No. 1, pp. 1–12 (2021).