反復改良法を用いた 量子線形アルゴリズムにおける測定回数削減

齊藤 由将^{1,a)} 李 信偉² 蔡 東生² 浅井 信吉¹

概要:量子線形アルゴリズムにおける解の精度と測定回数の関係について考える. 一般的に,量子コン ピュータから解を得るためには測定を行う必要があり,解の精度は測定回数に依存する. 解となる n 量子 ビット状態の $N = 2^n$ 個の成分を ϵ の精度で得るためには,測定のために精度 ϵ の量子状態を準備し,そ れを $O(N/\epsilon^2)$ 回測定する必要がある. そのため,高精度の解を得るためには非常に多くの測定が必要に なってしまう.本稿では,量子線形アルゴリズムにおける精度のために必要となる測定回数を減らすため に,反復改良法を用いた量子・古典ハイブリッドアルゴリズムを提案する.提案手法は要求精度 ϵ の解を $O(N \log(1/\epsilon))$ の測定回数で得ることができる.また本手法は量子線形アルゴリズムにおける精度に依存 する量子ビット数を削減することができる.

1. はじめに

量子コンピュータを用いることで,古典コンピュータよ りも高速に問題を解くことができると期待される.実際, 素因数分解を行う Shor のアルゴリズム [1] は素因数分解 の対象となる自然数に対して,一次方程式を解く Harrow-Hassidim-Lloyd(HHL) のアルゴリズム [2] は方程式のサイ ズに対して,古典アルゴリズムよりも指数関数的に高速で ある代表的な量子アルゴリズムである.

ー次方程式は科学や工学の多くの分野で登場し,高速か つ高精度に解くことが要求される.ここで一次方程式を 解くということは、与えられた係数行列 A とベクトルbに対して、Ax = b を満たすベクトルx を求めることで ある.一次方程式を効率良く解くために、行列 A の構造 (密・疎・対称など)に注目して様々な解法アルゴリズムが 用いられる.代表的なものとして、密行列に対してはガ ウスの消去法 [3]、疎で対称な行列に対しては共役勾配法 (CG 法)[4] が用いられる.精度は使用するアルゴリズムの 性質や浮動小数点演算による数値誤差の影響を受け、反復 改良法は数値誤差を減らすための手法である [5]、[6].実際 に、反復改良法は精度や計算効率を向上するために使用さ れる [7]、[8]、[9].

高速に計算するために,量子コンピュータを用いた一 次方程式解法アルゴリズムが最初に Harrow らによって提 案され [2], HHL アルゴリズムと呼ばれている. HHL ア ルゴリズムは疎なエルミート行列に対して用いられ, 解 x に対応する量子状態 $|x\rangle$ を構築し, そのための計算量は $\tilde{O}(\log(N)s^2\kappa^2/\epsilon)$ である [2]. ここで N, s, κ はそれぞれ行 列 A のサイズ, 非ゼロ要素数, 条件数であり, また ϵ は要 求される精度である. CG 法の計算量は $O(Ns\sqrt{\kappa}\log(1/\epsilon))$ であるため, HHL アルゴリズムは行列サイズ N に対して CG 法よりも指数関数的に高速である.

HHL アルゴリズムはその高速性から、ポートフォリオ 最適化 [10] や線形回帰 [11], [12] といった問題に対して応 用されており、解に対応する情報は量子状態として表現 される. つまり, 量子状態から解を取り出すためには測定 を行う必要がある. Harrow らはベクトル |x〉の1つの成 分を精度 ϵ で得るために $O(1/\epsilon^2)$ の測定回数が必要になる と考察している [2]. つまり, n 量子ビット状態における $N = 2^n$ 個の成分を精度 ϵ で得るためには $O(N/\epsilon^2)$ の測定 回数が必要になると考えられる.しかしながら高精度の解 $(\epsilon \sim 10^{-10})$ が要求される場合には、 $O(N/\epsilon^2)$ の測定回数 は現実的ではない. また, 計算基底を用いた測定はベクト ルの成分の大きさを求めることはできるが、符号の情報ま では求めることができない. 符号情報は精度において必要 不可欠な情報である.符号情報の推定,言い換えると,測 定から量子状態を推定するために量子状態トモグラフィー が用いられる [13], [14], [15]. 量子状態トモグラフィーは測 定データをもとに後処理を行うことで量子状態の推定をす る. この後処理として, 最尤推定法 [15] や線形回帰 [14] と いった最適化手法が用いられているがこれらの計算コスト

¹ 会津大学

² 筑波大学

 $^{^{}a)}$ m5241141@u-aizu.ac.jp

は一次方程式解法コスト以上である.そのため,一次方程 式解法において符号推定のために量子状態トモグラフィー を用いることは現実的ではないと考えられる.

本稿では,量子線形アルゴリズムにおいて精度 を求める ために必要となる $O(N/\epsilon^2)$ の測定回数を削減するために、 反復改良法 [5], [6] を適用した量子・古典ハイブリッドであ る反復改良量子線形アルゴリズムを提案する.本手法の精 度 ϵ の解を得るために必要となる測定回数は $O(N \log(1/\epsilon))$ であり,精度に対して指数関数的に測定回数を減らすこと ができる.また、副次的に、精度のために必要となる量子 資源を減らすことができる.本稿では,最初に2節で量子 線形アルゴリズムである HHL アルゴリズムと反復改良法 について紹介する.その後、3節で提案手法である反復改 良量子線形アルゴリズムについて説明する.本手法では, 量子状態トモグラフィーによる符号推定を行う代わりに, 3.1 節で説明するような残差のシフトを提案する. 3.2 節で は、本手法の測定回数や計算量について説明する.4節で は精度評価をするために数値実験を行う. 先ほど述べた残 差のシフトは誤差の収束に大きな影響を及ぼすため、4.1 節で紹介するように複数種類のシフトについて数値実験に よる調査を行う.最後に提案手法の考察とまとめをする.

2. 準備

提案手法について説明するために,まずは,量子線形ア ルゴリズムである HHL アルゴリズムと反復改良法につい て紹介する.

2.1 量子線形アルゴリズム HHL

ー次方程式を解く量子アルゴリズムは Harrow らによっ て提案され、HHL アルゴリズムと呼ばれている [2]. こ こで、A を正則で疎な $N \times N$ エルミート行列、b を N次元ベクトルとする、HHL アルゴリズムは一次方程式 Ax = bの解ベクトルxに対応する量子状態 $|x\rangle = x/||x|| =$ $A^{-1}|b\rangle / ||A^{-1}|b\rangle ||$ を、量子状態 $|b\rangle = b/||b||$ から構築す る、A がエルミートではない場合は、

$$\tilde{A} := \begin{bmatrix} \mathbf{0} & A \\ A^* & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \tilde{x} := \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ x \end{bmatrix}, \tilde{b} := \begin{bmatrix} b \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$
(1)

とすることで、 \tilde{A} はエルミートとなり、 $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{x}$ を解くこ とにすればいい.

ここで、行列 **A** の固有値を λ_j 、対応する固有ベクトルを $|u_j\rangle$ とする.すると、これらを用いて $\mathbf{A} = \sum_{j=1}^N \lambda_j |u_j\rangle\langle u_j|$ と書くことができる.行列 **A** が正則であれば、 $\mathbf{A}^{-1} = \sum_{j=1}^N 1/\lambda_j |u_j\rangle\langle u_j|$ と書ける.この表記を用いて、HHL アルゴリズムは $|x\rangle \propto \sum_{j=1}^N 1/\lambda_j |u_j\rangle\langle u_j|b\rangle$ として解を 構築する.HHL アルゴリズムに必要な量子ビット数は I + P + S量子ビットであり、入力状態 $|b\rangle$ と解状態 $|x\rangle$ の ために $I = \lceil \log_2 N \rceil$ 量子ビット、固有値を推定するために *P* 量子ビット,固有値の逆数を計算するために *S* = 1 量子 ビット使用する.

はじめに HHL アルゴリズムは初期状態として $|b\rangle^{I}|0\rangle^{P}|0\rangle^{S}$ を準備する.その後,行列 A のハミルトニアンシミュレーション e^{iAt} [16],[17]を用いた量子位相推定[18]を行い固有値を推定することで次の状態になる.

$$|b\rangle^{I}|0\rangle^{P}|0\rangle^{S} \mapsto \sum_{j=1}^{N} \beta_{j}|u_{j}\rangle^{I} |\tilde{\lambda}_{j}\rangle^{P}|0\rangle^{S}$$
(2)

今, Aはエルミートであるため, e^{iAt} はユニタリである. e^{iAt} の固有値は $e^{i\lambda_j t}$ で対応する固有ベクトルは $|u_j\rangle$ で あり,これは,Aの固有値 λ_j とその固有ベクトル $|u_j\rangle$ に対応する. e^{iAt} はユニタリであるため,その固有値 $ke^{2\pi i\theta}, 0 \le \theta < 1$ と表せる.行列Aの固有値 λ_j と行 列 e^{iAt} の固有値 $e^{i\lambda_j t}$ の対応を保つために,パラメータ tによって全ての固有値 λ_j を $[0,2\pi)$ 区間にスケーリン グする.このスケーリングによって $0 \le \lambda_j t/2\pi < 1$ と なる.ここで, $\lambda_j t/2\pi = l_{j,1}/2^1 + l_{j,2}/2^2 + \cdots l_{j,P}/2^P + \cdots = 0.l_{j,1}l_{j,2}\cdots l_{j,P}$ …と二進数で表示できる. $\tilde{\lambda}_j$ は $\tilde{\lambda}_j = l_{j,1}/2^1 + l_{j,2}/2^2 + \cdots l_{j,P}/2^P = 0.l_{j,1}l_{j,2}\cdots l_{j,P}$ をある. ここで, $|b\rangle = \sum_{j=1}^N \beta_j |u_j\rangle^I, \beta_j = \langle u_j | b \rangle \geq |b\rangle$ を固有ベク トル $|u_j\rangle$ で展開した.その後,P量子ビットを用いて推定 した固有値 $|\tilde{\lambda}_j\rangle^P$ をもとにその固有値の逆数をかける.

$$\mapsto \sum_{j=1}^{N} \beta_j |u_j\rangle^I |\tilde{\lambda}_j\rangle^P \left(\sqrt{1 - \frac{C^2}{\tilde{\lambda}_j^2}} |0\rangle + \frac{C}{\tilde{\lambda}_j} |1\rangle\right)^S \quad (3)$$

Cは量子状態を保つための定数である.その後,逆位相推 定を行うことで、 $\left|\tilde{\lambda}_{j}\right\rangle^{P} \mapsto \left|0\right\rangle^{P}$ と初期状態に戻す.最後 に量子ビット*S*を測定する.測定して $\left|1\right\rangle^{S}$ を得ることが できれば、

$$\mapsto \sqrt{\frac{1}{\sum_{j=1}^{N} \left|\frac{\beta_{j}C}{\tilde{\lambda}_{j}}\right|^{2}}} \sum_{j=1}^{N} \frac{\beta_{j}C}{\tilde{\lambda}_{j}} \left|u_{j}\right\rangle^{I} \left|0\right\rangle^{P} \left|1\right\rangle^{S} \qquad (4)$$

という状態になる.すると、解状態 $|x\rangle^{I}$ は

$$\left|x\right\rangle^{I} = \sqrt{\frac{1}{\sum_{j=1}^{N} \left|\frac{\beta_{j}C}{\tilde{\lambda}_{j}}\right|^{2}}} \sum_{j=1}^{N} \frac{\beta_{j}C}{\tilde{\lambda}_{j}} \left|u_{j}\right\rangle^{I} = \sum_{j=1}^{N} x_{j} \left|j\right\rangle$$
(5)

である. 測定によって $|1\rangle^{S}$ を得る確率は $O(1/\kappa^{2})$ である ため, $O(\kappa)$ 回の振幅増幅 [19] を行うことで確率を $O(1/\kappa)$ へとあげる [2].

HHL アルゴリズムは P 量子ビットを用いて推定した 固有値の逆数をかけることで解状態 $|x\rangle^{I}$ を構築する. 固 有値の精度は解の精度に大きな影響を及ぼすため,解の 精度は固有値推定に使用する量子ビット数 P によって決 まる.標準基底 $|j\rangle$ での測定を行うことで解を得ることが

Algorithm 1 Iterative improvement method for solving Ax = b

Ax = b				
Input: A matrix A , a vector b .				
1: Initialize:				
2: $r_0 = b, x = 0$				
3: for $m = 0, 1, 2, \dots$ do				
4: Solve $Ay_m = r_m$.				
5: Update $\boldsymbol{x} \leftarrow \boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}_m$.				
6: Compute residual $\boldsymbol{r}_{m+1} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$.				
7: end for				
Output: The solution vector \boldsymbol{x} .				

できるが、解成分の符号情報は失われてしまう. つまり、 $|x_{\text{sta}}\rangle := \sum_{j=1}^{N} |x_j| |j\rangle$ を得ることになる.量子状態トモグ ラフィー [13], [14], [15]を用いることで符号情報の回復が できるが、一次方程式を解くことに相当する計算コスト が必要になる.そのため、提案手法では量子状態トモグラ フィーを使用しない.

2.2 反復改良法

一次方程式 Ax = b に対する反復改良法は,残差 r を最小にする反復計算によって解精度の向上を行う [5],[6]. 理論的には反復を行う必要はないが,得られた解は数値誤 差の影響を受けるため残差はゼロにならない.そのため, 残差を最小にするための反復計算を行うことで精度の向上 を図る. Algorithm1 にまとめた反復改良法の手順につい て説明する.最初に得た解 $x = y_0$ が要求精度を満たして いれば反復を行う必要はない.満たしていない場合は残差 $r_m = b - Ax$ を右辺とする一次方程式 $Ay_m = r_m$ を再び 解き,解の更新 $x \leftarrow x + y_m$ を行う.

なお,通常は残差計算に *O*(*N*²) の計算量がかかるが,行 列 *A* が疎であれば *O*(*N*) の計算量で済む.

3. 反復量子線形アルゴリズム

提案する反復改良量子線形アルゴリズムは,一次方程式 を解くための量子線形アルゴリズムを使用した使用した反 復改良法である.本稿では,量子線形アルゴリズムとして HHL アルゴリズムを用いた.反復改良量子線形アルゴリ ズムは量子線形アルゴリズムを用いるための量子計算部分 と反復改良のための古典計算部分から構成される量子・古 典ハイブリッドアルゴリズムである.

3.1 提案手法の詳細

提案する反復改良量子線形アルゴリズムについて Algorithm2 にまとめた. これについて説明する. まず,本手法では量子状態トモグラフィーはその計算量から本手法において適当ではないと考えられるため使用しない. そのため,解となる状態 $|y\rangle = \sum_{j=1}^{N} y_j |j\rangle$ の成分が全て非負であ

る $|y_{\text{sta}}\rangle = \sum_{j=1}^{N} |y_j| |j\rangle$ を用いる. つまり, $|y_{\text{sta}}\rangle$ は $|y\rangle$ を 計算基底によって測定したものであり, 符号情報は含まれ ていない. 一般的に, 一次方程式の解成分には正負の符号 が混在し, 正規化されていない. そこで, 符号と解ベクト ルの大きさを推定するための手法も提案する.

まずは解ベクトルの大きさを推定する方法について説明 する.反復改良法は残差を右辺とする一次方程式を解くた め、反復計算によって精度が向上すると残差と得られる解 は小さくなる、本来の解を知ることはできないため、残差 rと右辺 $A|y_{sta}\rangle$ の大きさの比である $f_1 = ||\mathbf{r}||/||A|y_{sta}\rangle||$ を用いることによって大きさを推定する.

次に解成分の符号の推定について説明する.提案手法で は量子状態トモグラフィーを使用しないため, 解成分1つ 1つの符号を推定することをしない. その代わりとして, まずは,複素空間上のベクトルの符号 e^{if2} を用いて解成 分の符号が全て正または負の場合について対応する. ここ で $f_2 = \arg(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{A} | y_{\text{sta}}))$ である. それから次の反復改良の 計算を行う前に、あらかじめ解成分の符号が全て非負にな るようにベクトル x を用いて残差 r をシフトを行う.シ フト後、シフトされた残差 $r + A\tilde{x} = b - A(x - \tilde{x})$ を右 辺とする方程式を解く. このシフト操作によって得られる 解は全て非負であると考えられるため、計算基底による 測定のみで得られる解 |ysta) を使うことができ, 解として $f_1 e^{if_2} | y_{sta} \rangle$ を得ることができる.シフト操作を用いたこ とによって得られた解がシフトしているので、解の更新で はシフトした分 x を引く. このシフト操作によって, 解成 分に正負の符号が混在していたとしても反復計算によって 適切に解を改良することができる.本稿では、ベクトル *x* をシフトベクトルと呼ぶ. このシフトベクトルを厳密に決 めるためには一次方程式を解くことになるので、経験的に このシフトを決める必要がある. どのようなシフトベクト ルが適切なのかを調査するために、4.1節で述べるような 5種類のシフト方法を用いて数値実験を行った.

3.2 提案手法の測定回数と計算量

提案する反復改良量子線形アルゴリズムを用いて精度 *ϵ* の解を得るために必要な測定回数と計算量について説明 する.

反復改良法は反復計算によって解精度の向上が可能で ある [5], [6]. 理論的には精度 $\epsilon'(1 > \epsilon' > \epsilon)$ で得た解をも とに 1 回の反復改良を行うことで, $\epsilon' \times \epsilon'$ の精度の解を 得ることができる. つまり,反復改良を m 回行うことで ϵ'^m の精度の解が得られ,精度 ϵ を達成するために必要な 反復回数は $m = O(\log(1/\epsilon))$ である. それから,精度 ϵ' の解を得るために必要な測定回数は O(N) と考えられる. これらのことから,精度 ϵ の解を得るために O(N) 回の 測定を $O(\log(1/\epsilon))$ 回行えばいいため,測定回数は合計で

Algorithm	2	Iterative	$\operatorname{improvement}$	method	for	Quan
tum Linear S	Sol	ver HHL				

uun n	mour	0011	UL .	L L .		
Input:	A m	atrix	A ,	a	vector	b .

1: Initialize:

- 2: $r_0 = b, x = 0, \tilde{x}_0 = 0$
- 3: for $m = 0, 1, 2, \dots$ do
- 4: Obtain $|y_{\text{sta},m}\rangle$ via solving $A|y_m\rangle = |r_m\rangle$ by quantum linear solver such as HHL.
- 5: Estimate a scaling factor $f_1 = \frac{\|\mathbf{r}\|_2}{\|\mathbf{A}\|y_{\text{sta},m}\rangle\|_2}$.
- 6: Estimate a sign e^{if_2} , where $f_2 = \arg(\mathbf{r} \cdot A | y_{\mathrm{sta},m} \rangle)$.

Obtain approximate solution $\boldsymbol{y}_m = f_1 e^{if_2} |y_{\mathrm{sta},m}\rangle.$

- $oldsymbol{x}_m = oldsymbol{y}_m ilde{oldsymbol{x}}_m$
- 8: Update $\boldsymbol{x} \leftarrow \boldsymbol{x} + \boldsymbol{x}_m$
- 9: Determine a shift vector $\tilde{\boldsymbol{x}}_{m+1}$
- 10: Compute residual
- $\boldsymbol{r}_{m+1} = \boldsymbol{b} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x} \tilde{\boldsymbol{x}}_{m+1}).$

11: **end for**

7:

Output: The solution vector \boldsymbol{x} .

 $O(N) \times O(\log(1/\epsilon)) = O(N \log(1/\epsilon))$ となる.

次に、計算量について説明する. 先ほど述べたように精度 ϵ' の解を用いて反復改良を行う. つまり、量子計算によって 精度 ϵ' の解を構築すればいいことになる. 精度 ϵ の解の構 築は要求されない. HHL アルゴリズムの場合、解精度は固 有値推定のために使用する量子ビット数 Pによって決まる ため、精度 ϵ' の解を得るために必要な量子ビット数を用い れば十分であり、結果的に固有値推定のために必要となる量 子回路を削減できる. このことから量子計算部分に必要と なる計算量は、 ϵ' の精度で HHL アルゴリズムを実行する計 算量となる. これを $O(\tau(\epsilon'))$ とする. また、反復改良のた めの古典計算部分 (Algorithm2 のステップ 5~10) は O(N)で実行できる^{*1}. $O(\log(1/\epsilon))$ 回の反復を行うので、合計 で、 $O(\tau(\epsilon')) \times O(N) \times O(\log(1/\epsilon)) = O(\tau(\epsilon')N\log(1/\epsilon))$ である. これに測定回数が追加される.

4. 数值実験

提案手法の精度評価を行うために、次の行列 A および 二種類の解ベクトル $x_1 \ge x_2$ を用いた. 量子計算のために Qiskit[20], ver. 0.26 を用いて、ノイズなしの状態で計算を 行った.

4.1 問題設定

次の正則な4×4エルミート行列 A を用いた.

4 —	5	1	4	5		
	1	7	1	2	(S)
A -	4	1	8	6	(5)
	5	2	6	10		

^{*1} 量子線形アルゴリズムは疎行列を対象としているため



- 図 1 相対誤差の減少履歴: 解ベクトル x₁ を用いて,各反復で 10⁴
 回の測定を行った場合の相対誤差.黒の点線は P = 8 での分 解能.
- Fig. 1 Relative error decrease history : The relative error with 10^4 measurements in each iteration using the solution vector \boldsymbol{x}_1 . The black dotted line is the resolution for P = 8.

この行列 **A** の最大固有値は 18.68 ..., 最小固有値は 1.86 ..., 条件数は 10.01 ... である.また, 解ベクトルとして成分 の全てが正である **x**₁ と, 正負の成分が含まれる **x**₂ を用 いた.

$$\boldsymbol{x}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0.1 & 0.01 & 10 \end{bmatrix}^T$$
 (7)

$$\boldsymbol{x}_2 = \begin{bmatrix} -1 & 0.1 & 0.01 & 10 \end{bmatrix}^T \tag{8}$$

それから、あらかじめ Ax_j , (j = 1, 2) を計算することで b_j を準備し、 $Ax = b_j$ を解いた.

また、シフトベクトル \hat{x} については次の5種類を用いた.

1) $\tilde{x}_{m+1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^{T}$ 2) $\tilde{x}_{m+1} = \frac{\|x_{m}\|}{\|x_{m-1}\|} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}^{T}$ 3) $\tilde{x}_{m+1} = 0.1 |x_{m}|$ 4) $\tilde{x}_{m+1} = \frac{\|x_{m}\|}{\|x_{m-1}\|} |x_{m}|$ 5) $\tilde{x}_{m+1} = \sqrt{\frac{\|x_{m}\|}{\|x_{m-1}\|}} |x_{m}|$

ここで、 $|x_m|$ は x_m の成分の絶対値をとったベクトルである. 手法1はシフトを行わない. 手法2は全ての成分が等しく、手法3、4、5はベクトル $|x_m|$ の成分に比例するものである. m = 0のときは x_{-1} の代わりに x_0 を用いた.

精度については相対誤差 $\|x_j - x\|/\|x\|, (j = 1, 2)$ を用 いて評価をした.また、全ての計算において倍精度浮動小 数点数を用いたので、有効桁数はおよそ 10 進数で 16 桁で あり [21]、これが本稿における精度の上限である.

4.2 計算結果

HHL アルゴリズムを実行するにあたって固有値推定の ために P = 8 量子ビット使用し、1 反復のために 10^4 回の 測定を行い、50 回の反復をした. つまり、合計で 51×10^4



 図 2 相対誤差の減少履歴:解ベクトル x₂ を用いて、各反復で 10⁴
 回の測定を行った場合の相対誤差. 黒の点線は P = 8 での分 解能.

Fig. 2 Relative error decrease history : The relative error with 10^4 measurements in each iteration using the solution vector x_2 . The black dotted line is the resolution for P = 8.



- 図3 解ベクトル x1 を用いた相対誤差および測定回数と反復回数の 関係:赤線は各反復に 10⁴ 回の測定を行なった結果で図 1 の シフト手法 4 の結果を抜き出したもの.オレンジと青の破線 はシフト手法 4 を用いて各反復にそれぞれ 10³, 10⁵ 回の測定 を行なった結果である。数字は反復回数を表す.
- Fig. 3 The relation between the relative error, the number of measurements and iterations with the solution vector x_1 . Red solid line is an excerpt of the result of shift method 4 from fig. 1. Orange and blue dashed lines are the results with the same conditions except that only the number of measurements in each iteration is set to 10^3 and 10^5 respectively.

回の測定を行った.その計算結果が図1および図2である.図3は反復回数と測定回数の関係を見るために,各反復における測定回数を10³と10⁵にした計算結果を追加したものである.また,測定だけではなく状態ベクトル|y/ を直接使用した計算も行った.状態ベクトルを用いた計算では符号情報を失わないため,シフト操作は行わなかった.

図1は一次方程式 $Ax = b_1$ を解いて得られた解 x_1 の相 対誤差を示したものである.横軸が反復回数,縦軸が相対 誤差である.縦軸のメモリの絶対値をとったものが得られ た解の精度の桁数である.黒色の破線は固有値の分解能を 意味する.解である状態ベクトル $|y\rangle$ を直接用いた計算は 反復のたびにおよそ2桁ずつ精度を改善し,10反復でお よそ16桁の精度を得ることができた.シフト1)を用いた 計算ではおよそ3桁の精度の解を得られた.シフト2)を 用いた計算では誤差が振動しており,精度の改善ができて いない.シフト3)を用いた計算では4桁の精度の解を得 ることができた.シフト4)を用いた計算では13桁の精度 の解を得ることができ,誤差の減少が1番速い.シフト5) を用いた計算ではおよそ10桁の精度の解を得ることがで き,2番目に誤差の減少が速い.

図 2 は一次方程式 $Ax = b_2$ を解いて得られた解 x_2 の相 対誤差を示したものである.状態ベクトルを用いた計算で は 9 回の反復でおよそ 16 桁の精度の解を得ることができ た.シフト 1)を用いた計算ではおよそ 1 桁の精度を得る ことができた.シフト 2)を用いた計算では誤差が振動し ており、精度の改善ができていない.シフト 3)を用いた 計算ではシフト 1)と同様に誤差が減少し、およそ 1 桁の 精度を得ることができた.シフト 4)を用いた計算では 16 桁の精度を得ることができており、1 番精度の良い結果で ある.シフト 5)を用いた計算では 14 桁の精度を得ること ができ、2 番目に良い結果である.

図 3 はシフト 4) 用いて一次方程式 $Ax = b_1$ を解いて 得た結果で,相対誤差および測定回数と反復回数の関係を 示す.赤線は図 1 のシフト 4) の結果を抜き出したもので ある.オレンジの線と青色の線は,各反復における測定回 数だけをそれぞれ 10³ と 10⁵ にして計算して結果である. 横軸は合計測定回数で,縦軸は相対誤差である.各反復に 10⁴ 回の測定をした計算 (赤色) と各反復に 10⁵ 回の測定を した計算 (青色) はどちらも少なくとも 12 桁の精度を得て いる.各反復に 10³ 解の測定を行った計算 (オレンジ色) で は 6 桁の精度を得ることができた.

5. 考察

図1と図2は誤差の減少履歴であり、シフト手法によっ て誤差の減少速度が異なるが、反復を繰り返すことで精度 の改善ができている.これは解成分に異符号が混在してい たとしても、本手法によって精度向上が可能であることを 意味する.実際、図2のシフト4)の結果(赤線)を見ると、

精度 $\epsilon = 10^{-13}$ の解を 5.1×10^5 回の測定と,わずか P = 8量子ビットを用いることで得ている.通常の HHL アルゴ リズムを用いてこの結果を得るためには,まず,少なくと も 13 桁の精度で固有値推定を行う必要があり,そのため には少なくとも P = 44 量子ビットが必要となる.それか ら、 $1/\epsilon^2 = 10^{26}$ 回に比例する測定回数が必要になり,量 子状態トモグラフィーを行う計算コストが追加される.特 に、 10^{26} の測定回数は現実的に実行することができない. 一方で,提案手法では 5.1×10^5 回の測定で済んでおり,劇 的に測定回数を減らすことに成功している.また,精度の ために必要となる量子ビット数も削減できている.

量子状態トモグラフィー [13], [14], [15] を用いることで 状態ベクトルを用いた計算と同程度の性能が出ると期待で きる.

図3は反復回数と測定回数の関係を示しており, 解ベク トルとして x1 とシフト手法 4) を用いたものである. 測定 回数 10⁴ での結果を見ると、13 桁の精度を得るために合 計で 5.1 × 10⁵ 回の測定を行ったことがわかる.一方で, 測定回数 10⁵ での結果を見ると,4回目の反復では1桁の 精度しか得られていない. 同程度の測定回数であったとし ても,反復回数を増やした方が良いと考えられる.測定回 数 10³ での結果を見ると,測定回数が少なかったとしても 反復を繰り返すことで誤差を減らすことができることがわ かる.しかし、1回の反復で改善される精度がわずかであ り、反復によって十分な精度向上ができていない. そのた め要求精度を得るために必要な反復回数が増えてしまうと 考えられる.これらのことから、効果的な測定回数と反復 回数が存在すると考えられる. 適切な測定回数と反復回数 を決めることは難しいと考えられるが、本手法は要求精度 を満たすために動的に測定回数と反復回数を変えることが できる.

6. まとめ

本稿では,量子線形アルゴリズムにおける精度のための 測定回数を削減するために,反復改良法を量子線形アルゴ リズムに適用することを提案した.提案手法は解を得るた めの量子計算部分と反復改良のための古典計算部分によっ て構成されるハイブリッドアルゴリズムである.提案手法 を用いることで $O(N \log(1/\epsilon))$ の測定回数で精度 ϵ の解を 得ることができ,これは従来の $O(N/\epsilon^2)$ の測定回数と比較 して,精度に対して指数関数的に測定回数が少ない.実際 に提案手法で数値計算を行い,高精度の解を少ない測定回 数で得ることができた.

また,本手法は HHL アルゴリズム [2] 以外の量子線形 アルゴリズム [22], [23], [24], [25] も用いることができる. 追加の量子ビットや量子回路を必要とするが,量子振幅推 定 [19], [26], [27] を用いることでより測定回数を減らすこ とができると考えられる. 反復改良のための評価関数を適切に定義することができ れば,最適化問題 [10], [11], [12] へと本手法を適用するこ とができるだろう.

参考文献

- Shor, P. W.: Polynomial-time algorithms for prime factorization and discrete logarithms on a quantum computer, *SIAM review*, Vol. 41, No. 2, pp. 303–332 (1999).
- [2] Harrow, A. W., Hassidim, A. and Lloyd, S.: Quantum Algorithm for Linear Systems of Equations, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 103, p. 150502 (2009).
- [3] Golub, G. H. and Van Loan, C. F.: Matrix Computations, The Johns Hopkins University Press, third edition (1996).
- [4] Hestenes, M. R., Stiefel, E. et al.: Methods of conjugate gradients for solving linear systems, Vol. 49, No. 1, NBS Washington, DC (1952).
- [5] Wilkinson, J. H.: Rounding errors in algebraic processes, Courier Corporation (1994).
- [6] Moler, C. B.: Iterative refinement in floating point, Journal of the ACM (JACM), Vol. 14, No. 2, pp. 316–321 (1967).
- [7] Buttari, A., Dongarra, J., Langou, J., Langou, J., Luszczek, P. and Kurzak, J.: Mixed precision iterative refinement techniques for the solution of dense linear systems, *The International Journal of High Performance Computing Applications*, Vol. 21, No. 4, pp. 457–466 (2007).
- [8] Langou, J., Langou, J., Luszczek, P., Kurzak, J., Buttari, A. and Dongarra, J.: Exploiting the performance of 32 bit floating point arithmetic in obtaining 64 bit accuracy (revisiting iterative refinement for linear systems), SC'06: Proceedings of the 2006 ACM/IEEE conference on Supercomputing, IEEE, pp. 50–50 (2006).
- [9] Buttari, A., Dongarra, J., Kurzak, J., Luszczek, P. and Tomov, S.: Using mixed precision for sparse matrix computations to enhance the performance while achieving 64-bit accuracy, ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS), Vol. 34, No. 4, pp. 1–22 (2008).
- [10] Rebentrost, P. and Lloyd, S.: Quantum computational finance: quantum algorithm for portfolio optimization, arXiv preprint arXiv:1811.03975 (2018).
- [11] Wiebe, N., Braun, D. and Lloyd, S.: Quantum Algorithm for Data Fitting, *Physical Review Letters*, Vol. 109, No. 5 (2012).
- [12] Wang, G.: Quantum algorithm for linear regression, *Physical review A*, Vol. 96, No. 1, p. 012335 (2017).
- [13] Gross, D., Liu, Y.-K., Flammia, S. T., Becker, S. and Eisert, J.: Quantum state tomography via compressed sensing, *Physical review letters*, Vol. 105, No. 15, p. 150401 (2010).
- [14] Qi, B., Hou, Z., Li, L., Dong, D., Xiang, G. and Guo, G.: Quantum State Tomography via Linear Regression Estimation, *Scientific Reports*, Vol. 3, No. 1 (2013).
- [15] James, D. F., Kwiat, P. G., Munro, W. J. and White, A. G.: On the measurement of qubits, Asymptotic Theory of Quantum Statistical Inference: Selected Papers, World Scientific, pp. 509–538 (2005).
- [16] Berry, D. W., Ahokas, G., Cleve, R. and Sanders, B. C.: Efficient quantum algorithms for simulating sparse Hamiltonians, *Communications in Mathematical Physics*, Vol. 270, No. 2, pp. 359–371 (2007).
- [17] Berry, D. W., Childs, A. M., Cleve, R., Kothari, R. and

Somma, R. D.: Exponential improvement in precision for simulating sparse Hamiltonians, *Proceedings of the forty-sixth annual ACM symposium on Theory of computing*, pp. 283–292 (2014).

- [18] Nielsen, M. A. and Chuang, I. L.: Quantum computation and quantum information, Vol. 54, No. 2 (2001).
- [19] Brassard, G., Hoyer, P., Mosca, M. and Tapp, A.: Quantum amplitude amplification and estimation, *Contempo*rary Mathematics, Vol. 305, pp. 53–74 (2002).
- [20] ANIS, M. S., Abraham, H. et al.: Qiskit: An Opensource Framework for Quantum Computing (2021).
- [21] Goldberg, D.: What every computer scientist should know about floating-point arithmetic, ACM computing surveys (CSUR), Vol. 23, No. 1, pp. 5–48 (1991).
- [22] Ambainis, A.: Variable time amplitude amplification and a faster quantum algorithm for solving systems of linear equations, arXiv preprint arXiv:1010.4458 (2010).
- [23] Childs, A. M. and Wiebe, N.: Hamiltonian simulation using linear combinations of unitary operations, arXiv preprint arXiv:1202.5822 (2012).
- [24] Wossnig, L., Zhao, Z. and Prakash, A.: Quantum Linear System Algorithm for Dense Matrices, *Physical Review Letters*, Vol. 120, No. 5 (2018).
- [25] Takahira, S., Ohashi, A., Sogabe, T. and Usuda, T. S.: Quantum algorithm for matrix functions by Cauchy's integral formula, *Quantum Information and Computation*, Vol. 20, No. 1&2, p. 14–36 (2020).
- [26] Suzuki, Y., Uno, S., Raymond, R., Tanaka, T., Onodera, T. and Yamamoto, N.: Amplitude estimation without phase estimation, *Quantum Information Pro*cessing, Vol. 19, No. 2, pp. 1–17 (2020).
- [27] Grinko, D., Gacon, J., Zoufal, C. and Woerner, S.: Iterative quantum amplitude estimation, *npj Quantum Information*, Vol. 7, No. 1, pp. 1–6 (2021).