

# 断熱量子計算による数値勾配推定の研究

中山 茂<sup>1,a)</sup>

**概要:** 断熱量子計算は、断熱的發展による量子計算として組み合わせ最適化問題における量子アルゴリズムとして提案されてから、充足可能性問題や隠れ部分群問題など多くの問題に適用されてきている。量子アルゴリズムは、ショアの因数分解やグローバーのデータベース検索に代表されるように、検算が容易な問題に向いているとされていたが、最近、関数微分のような数値計算にも応用できることが分かってきた。関数微分の数値計算が、量子コンピュータで高速に行えることは、数理工学上、非常に重要であると考えられる。ここでは、断熱量子計算を用いても解けることを示し、観測確率の高い方法で関数の数値勾配推定問題が解ける方法を提案し、数値シミュレーションで良好な結果を得た。

**キーワード:** 量子アルゴリズム、断熱量子計算、ベルンシュタイン・ヴァジラニ問題、関数数値勾配推定問題

## Study on Numerical Gradient Estimation by Adiabatic Quantum Computation

SHIGERU NAKAYAMA<sup>1,a)</sup>

**Abstract:** Adiabatic quantum computation has been proposed as a quantum algorithm with adiabatic evolution to solve combinatorial optimization problem, then it has been applied to many problems like satisfiability problem and hidden subgroup problem. Quantum algorithm is considered to be good for confirmative problems such as Shor's factorization and Grover's database search. Recently functional numerical gradient estimation problem has been solved by using quantum algorithm. If the numerical calculation of functional gradient can be speeded-up on quantum computer, the quantum algorithm is very promising on mathematical engineering. In this paper, we try to apply the adiabatic quantum computation to functional numerical gradient estimation problem. We propose a method to solve the problem efficiently, and obtain the good result of numerical simulation.

**Keywords:** quantum algorithm, adiabatic quantum computation, Bernstein-Vazirani problem, functional numerical gradient estimation problem

### 1. はじめに

量子アルゴリズムは、ショアの因数分解やグローバーのデータベース検索に代表されるように、検算が容易な問題に向いているとされていたが、最近、関数微分のような数値計算 [1] にも応用できることが分かってきた。関数微分の数値計算が、量子コンピュータで高速に行えることは、

数理工学上、非常に重要であると考えられる。

ここで用いる断熱量子計算は、2000年に Farhi ら [2] によって断熱的發展による量子アルゴリズムとしてはじめて提案され、NP 完全問題である 3-SAT 問題に適用されてから [3]、大きな注目を浴びた。さらに、隠れ部分群問題であるドイッチ問題 [4], [5] やドイッチ・ジョサ問題 [6]、ベルンシュタイン・ヴァジラニ問題 [7], [8] にも断熱量子計算で解く試みが行われてきた。断熱量子計算は、オラクル計算で用いられていた補助ビットを用いる必要が無いために、従来の量子アルゴリズムよりも少ない量子ビット数で解け、

<sup>1</sup> 鹿児島大学  
Kagoshima University, Korimoto, Kagoshima 890-0065,  
Japan

<sup>a)</sup> shignaka@ibe.kagoshima-u.ac.jp

ユニタリ変換を繰り返した後、最後に関数を一回だけ調べればよい特徴がある。

本論文では、断熱量子計算を用いても関数の数値勾配推定問題が解けることを初めて示し、断熱量子計算で用いられていた従来の線形ステップ・パラメータよりも3次元ステップ関数を用いたほうが数値勾配推定が高い確率で行えることを数値シミュレーションで示した。

## 2. 関数の数値勾配推定問題

関数の数値勾配推定問題のオラクル計算による量子アルゴリズムは、2005年にS.P. Jordan[1]によって考案されたもので、任意の $d$ 次元の任意の線形・非線形関数の微分としての数値勾配

$$\nabla f(x_1, x_2, \dots, x_d) = \left( \frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_d} \right) \quad (1)$$

が一回の関数への問い合わせだけで計算できることを証明した。ここで、関数を解析的に微分した形が求められるのではなく、関数微分としての勾配を数値として求めることに注意する。そのために、関数が非線形関数でもよく、ある点での非線形関数微分としての勾配でも数値として計算できることを意味する。

古典的アルゴリズムでは、たとえば、原点での $d$ 次元の関数の数値微分は、十分に小さな定数 $h$ を用いて、つぎのように $i$ 番目の次元毎に微分係数を近似計算する必要がある、 $d+1$ 回の関数への問い合わせが必要となる。

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} \approx \frac{f(h) - f(0)}{h} \quad (2)$$

つまり、関数数値勾配推定問題の古典的アルゴリズムでは $O(d)$ の計算量が必要であったが、量子アルゴリズムでは $O(1)$ の計算量でよいことになる。また、断熱量子計算を用いることにより、Jordanの量子アルゴリズムよりも少ない量子ビット数で、ユニタリ変換を繰り返して関数への問い合わせを一回で解けることを示す。

## 3. 数値勾配推定の量子アルゴリズム

### 3.1 ベルンシュタイン・ヴァジラニ問題

Jordanによって考案された数値勾配推定の量子アルゴリズムは、1993年に考案されたベルンシュタイン・ヴァジラニ問題[7]を参考にしたと言われている。

ベルンシュタイン・ヴァジラニ問題とは、関数 $f(x)$ が $n$ 量子ビットの入力変数 $x$ に対して、つぎのようなバイナリ値を持つとする。

$$f(x|x \in \{0, 1\}^n) \rightarrow \{0, 1\} \quad (3)$$

ここで、この関数が $a \in \{0, 1\}^n, b \in \{0, 1\}$ となる定数 $a, b$ をつぎのような形で持つことが約束されている。

$$f(x) = b \oplus x \cdot a \quad (4)$$

ただし、 $\oplus$ は2を法とする加算で、 $x \cdot a$ は2を法とするビット毎の内積である。このとき、問題は、定数 $b$ の値は0か1かに分かっているので省略されることが多いが、いかにして関数への問い合わせを少なくして、定数 $a$ の値を決定できるかという問題である。

一般に、古典的アルゴリズムでは $n$ ビットの入力変数では $n$ 回の問い合わせが必要となるが、ベルンシュタイン・ヴァジラニによる量子アルゴリズムでは、関数 $f(x) = b \oplus x \cdot a$ における定数 $a$ を求めるには、関数 $f(x)$ への問い合わせは一回で良いことになる[8]。

### 3.2 関数の数値勾配推定問題

そこで、Jordan[1]は関数 $f(x)$ の形をつぎのように考えた。

$$f(x) \approx f(0) + x \cdot \nabla f \quad (5)$$

ただし、 $x \cdot \nabla f$ は内積であり、定数 $a$ を求めたベルンシュタイン・ヴァジラニ問題と同様に、関数微分の数値勾配 $\nabla f$ を一回で計算できることを示した。詳細はJordanによる先行研究[1]を参考にされたいが、ベルンシュタイン・ヴァジラニ問題と同様にオラクル計算で位相のkick-backと量子フーリエ変換を用いて解かれている。

まず、関数の入力変数 $x$ を入力レジスタに符号化するために、つぎのように非負の整数 $m \in \{0, 1, 2, \dots, N-1\}$ に変換する。

$$x = \frac{h}{N-1} \left( m - \frac{N-1}{2} \right) \quad (6)$$

ここで、 $h$ は微分勾配を調べる $x$ 座標の微少区間である。

その結果、Jordanによれば、補助量子ビット数 $N_0$ と入力量子ビット数 $N$ を用いたオラクルの出力は、スケール因子 $s$ を用いて、つぎのように入力レジスタ $m \in \{0, 1, 2, \dots, N-1\}$ に対する総和となる。

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=0}^{N-1} e^{i \frac{2\pi}{N_0} s f(x)} |m\rangle \quad (7)$$

十分小さな $x$ に対しては、 $f(x) \approx f(0) + x \cdot \nabla f$ であるから、これを代入すると、つぎのように書ける。

$$\frac{1}{\sqrt{N}} e^{i 2\pi s \left[ \frac{f(0)}{N_0} - \frac{h \nabla f}{2 N_0} \right]} \sum_{m=0}^{N-1} e^{i \frac{2\pi}{N_0} \left[ \frac{h s m}{N-1} \right] \nabla f} |m\rangle \quad (8)$$

ここで、スケール因子 $s$ は、精度を最大限にするために、つぎのように設定し、

$$s = \frac{N_0(N-1)}{N h}, \quad (9)$$

総和の左にある $m$ に無関係なグローバルな位相項は無視できるので、つぎのように簡単に書き直せる。

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=0}^{N-1} \omega^{m \nabla f} |m\rangle \quad (10)$$

ここで、一般に  $\omega = \exp(i2\pi/N)$  である。最後にこれを量子フーリエ変換すれば、数値勾配  $|\nabla f\rangle$  が得られるとされている。

### 3.3 関数の数値勾配の符号化

関数の数値勾配推定問題で、数値勾配を2ビット精度(つまり勾配は0, 1, 2, 3のどれかになる)で推定する1次元関数の簡単な場合での断熱量子計算法を説明する。d次元関数の数値勾配を高精度に行うためには、ビット数を増やせばよいことになる。量子ビット数が2ビットで  $N = 2^2$  の場合の数値勾配を推定する。

関数の入力変数  $x$  を入力レジスタに符号化するために、微分区間を  $h = 1$  とすると、2量子ビットの入力レジスタに対して、2進数で表すと、

$$|m\rangle \in \{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\} \quad (11)$$

と書け、つぎのように関数の入力変数が対応する。

$$x \in \left\{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{2}\right\} \quad (12)$$

この入力変数  $x$  に対応する関数の形として、 $f(x) = 2x + 1$  のような線形関数でも非線形関数でもよいが関数の勾配として  $\nabla f = 2$  を持った、つぎのような関数を考えることにする。

$$f(x) \in \left\{0, \frac{2}{3}, \frac{4}{3}, \frac{6}{3}\right\} \quad (13)$$

ここで、精度を最大限にするためのスケール因子  $s$  は、 $N_0 = N = 4$  とすると、 $s = 3$  となるので、

$$sf(x) \in \{0, 2, 4, 6\} \quad (14)$$

となる。そこで、オラクルの出力の式(10)は、

$$[|00\rangle + \omega^{\nabla f} |01\rangle + \omega^{2\nabla f} |10\rangle + \omega^{3\nabla f} |11\rangle]/2 \quad (15)$$

となり、ここでは、 $\omega$  は2量子ビットを例にしているので、 $\omega = \exp(i2\pi/2^2)$  で、1の2乗乗根  $\omega^4 = 1$  である。

さて、 $|\delta\rangle \in \{|00\rangle, |10\rangle\}$  に対しては、 $sf(x) \oplus N_0$  は0なので、状態ベクトルは変えないが、 $|\delta\rangle \in \{|01\rangle, |11\rangle\}$  に対しては、 $sf(x) \oplus N_0$  は2なので、状態ベクトルの上位ビットを反転させる必要がある。そのために、最終的なオラクルの出力は、

$$[|00\rangle + \omega^{3\nabla f} |01\rangle + \omega^{2\nabla f} |10\rangle + \omega^{\nabla f} |11\rangle]/2 \quad (16)$$

となる。

### 3.4 量子フーリエ変換後の状態ベクトル

そこで、最終的には式(17)を量子フーリエ変換すれば、解が得られることになるので、各状態ベクトル  $|00\rangle$ ,  $\omega^{3\nabla f} |01\rangle$ ,  $\omega^{2\nabla f} |10\rangle$ ,  $\omega^{\nabla f} |11\rangle$  をそれぞれつぎのように量子フーリエ変換し、これらを各状態ベクトル  $|00\rangle$ ,  $|01\rangle$ ,

$|10\rangle$ ,  $|11\rangle$  毎にまとめると、観測される最終的な状態ベクトルは、つぎのように書き直せる。

$$|\psi_f\rangle = \alpha |00\rangle + \beta |01\rangle + \gamma |10\rangle + \delta |11\rangle. \quad (17)$$

ここで、係数  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$  は、つぎようになる。

$$\alpha = [1 + \omega^{3\nabla f} + \omega^{2\nabla f} + \omega^{\nabla f}]/4, \quad (18)$$

$$\beta = [1 + \omega^{1+3\nabla f} + \omega^{2+2\nabla f} + \omega^{3+\nabla f}]/4, \quad (19)$$

$$\gamma = [1 + \omega^{2+3\nabla f} + \omega^{4+2\nabla f} + \omega^{6+\nabla f}]/4, \quad (20)$$

$$\delta = [1 + \omega^{3+3\nabla f} + \omega^{6+2\nabla f} + \omega^{9+\nabla f}]/4. \quad (21)$$

たとえば、関数の勾配として  $\nabla f = 2$  を持った関数と考えると、 $1 + \omega + \omega^2 + \omega^3 = 0$ ,  $\omega = i$ ,  $\omega^2 = -1$ ,  $\omega^3 = -i$  の性質を利用し、各状態ベクトルの係数は  $\alpha = 0$ ,  $\beta = 0$ ,  $\gamma = 1$ ,  $\delta = 0$  となる。そのために、観測される状態ベクトルは  $|10\rangle$  となり、関数の勾配として2を得ることになる。また、関数の勾配として  $\nabla f = 0$ ,  $\nabla f = 1$ ,  $\nabla f = 3$  を持った関数でも同様に計算でき、観測される状態ベクトルは  $|00\rangle$ ,  $|01\rangle$ ,  $|11\rangle$  となり、関数の勾配としてそれぞれ0, 1, 3を得ることになる。

そこで、この係数  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$  を持った式(17)の出力状態ベクトルを断熱量子計算における終状態  $|\psi_f\rangle$  にすれば、関数の数値勾配推定問題を断熱量子計算でも解くことが可能となることを、つぎに示そう。

## 4. 数値勾配推定での断熱量子計算法

### 4.1 シュレディンガー方程式の差分表現

断熱量子計算は、ハミルトニアン  $H$  の固有値(エネルギー)が最小(または最大)となる状態ベクトル  $|\psi(t)\rangle$  の固有状態を求める問題となる。この状態ベクトル  $|\psi(t)\rangle$  は、つぎのシュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = H |\psi(t)\rangle \quad (22)$$

に従って時間発展する。ハミルトニアン  $H$  が時間に依存しないとき、変数分離型で微分方程式が解け、計算機シミュレーションのために、つぎのような差分表現にする。

$$|\psi(t + \Delta)\rangle = e^{-iH\Delta} |\psi(t)\rangle \quad (23)$$

ここで、簡単のためプランク定数は  $\hbar = 1$  とした。断熱量子計算とは、時間発展するときに、量子状態を非常にゆっくりと断熱的に変化させることにより、その量子状態のエネルギーを最も低い基底状態に保ったまま変化させて、最終的に求める解の状態を得ようとするものである。

### 4.2 断熱量子計算でのハミルトニアン

断熱量子計算を式(23)のような差分表現で離散化するとき、0から1に変化する量子状態のステップ・パラメー

タ  $s$  を導入すると、ステップ  $s$  は 0 から 1 まで変化し、つぎのハミルトニアンは与えられた問題に依存しない初期状態のハミルトニアン  $H_i$  から与えられた問題に依存する終状態のハミルトニアン  $H_f$  へと変化させる。

$$H(s) = (1-s)H_i + sH_f \quad (24)$$

そうすれば、量子状態は、つぎのようなユニタリ変換でステップ毎に変化すると近似でき、最終的な解の状態に落ち着くと考えられる [3]。

$$|\psi^{(h)}\rangle = e^{-i(1-s)H_i\Delta - isH_f\Delta} |\psi^{(h-1)}\rangle \quad (25)$$

ここで、ステップ・パラメータ  $s$  ( $0 \leq s \leq 1$  で変化する実数) を  $s = h/(j+1)$  (Das ら [4] の理論の 8 回と合わせるために、 $j = n^3$  とし、繰り返しステップ総数は 8 回となる) として整数パラメータ  $h$  ( $1 \leq h \leq j+1$  で変化する整数) に対応する。 $\Delta$  は、実行のために要求される時間変化を決めるパラメータで、小さくするとゆっくりと状態変化し、大きいと状態変化が早くなる。これも、Das ら [4] の設定と比較するために、 $\Delta=1$  とした。

そして、このユニタリ変換  $U^{(h)} = e^{-i(1-s)H_i\Delta - isH_f\Delta}$  を繰り返すことにより、状態ベクトルの混合による多様化と状態ベクトルの位相シフトによる集中化が起こり、複素数の確率振幅同士の干渉効果により、求める解の確率振幅を大きくし、非解の状態ベクトルの確率振幅を小さくし、出来るだけ高い確率で、解を探索する方法であるが、更に効率よく解探索を行うために、従来から提案しているステップ・パラメータの非線形化を行う。

#### 4.3 ステップ・パラメータの非線形化

断熱量子計算でのハミルトニアンの一般化として、初期状態のハミルトニアン  $H_i$  から終状態のハミルトニアン  $H_f$  への移行で、ステップ・パラメータ  $s$  の非線形的変化にも対応できるように拡張したステップ関数  $p(s)$  を用いると、つぎのように書ける。

$$H(s) = (1-p(s))H_i + p(s)H_f \quad (26)$$

ここで、ステップ関数の条件として  $p(0) = 0, p(1) = 1$  を満たす単調増加関数を仮定すると、いろいろな非線形関数が考えられるが、線形関数の場合は  $p(s) = s$  となり、ここではそれを拡張した非線形関数として、3 次関数  $p(s) = 4(s-0.5)^3 + 0.5$  を提案する。2 次関数  $p(s) = s^2$  や  $p(s) = 2s - s^2$  も考えられるが、最終的な結果が悪くなり、ここでは線形関数  $p(s) = s$  と 3 次関数  $p(s) = 4(s-0.5)^3 + 0.5$  との比較を行った。

#### 4.4 初期状態のハミルトニアン

初期状態として、全解候補の確率振幅が均等になる状態を準備すると、2 進数表記で表すと、つぎのようになる。

$$|\psi_i\rangle = \frac{1}{2}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle), \quad (27)$$

また、この初期状態でのハミルトニアンは、与えられた関数の数値勾配推定問題には依存しないので、つぎのように計算できる。

$$H_i = I - |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 3 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 3 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 3 \end{pmatrix} \quad (28)$$

ここで、 $I$  は  $4 \times 4$  の恒等行列である。

この初期状態のハミルトニアンは、非対角項成分があるためにユニタリ変換  $U_{SM} = e^{-i(1-p(s))H_i}$  は、状態ベクトル間の確率振幅を混ぜる働きがあり、解探索での解の多様性を生成する効果があると考えられる。

#### 4.5 終状態のハミルトニアン

終状態  $|\psi_f\rangle$  でのハミルトニアン  $H_f$  は、 $H_f = I - |\psi_f\rangle\langle\psi_f|$  となり、終状態  $|\psi_f\rangle$  の関数の数値勾配推定問題の関数微分  $\nabla f$  に依存し、

$$|\psi_f\rangle = \alpha|00\rangle + \beta|10\rangle + \gamma|10\rangle + \delta|11\rangle, \quad (29)$$

とすると、これらの係数  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  として、数値勾配推定のそれぞれ式 (18)-(21) を用いることにする。

そこで、終状態  $|\psi_f\rangle$  でのハミルトニアン  $H_f$  は、つぎのように書ける。

$$H_f = \begin{pmatrix} 1-\alpha^2 & -\alpha\beta & -\alpha\gamma & -\alpha\delta \\ -\alpha\beta & 1-\beta^2 & -\beta\gamma & -\beta\delta \\ -\alpha\gamma & -\beta\gamma & 1-\gamma^2 & -\gamma\delta \\ -\alpha\delta & -\beta\delta & -\gamma\delta & 1-\delta^2 \end{pmatrix} \quad (30)$$

ここで、たとえば、関数数値勾配推定問題での関数微分の数値勾配が  $\nabla f = 2$  であれば、 $\alpha = 0, \beta = 0, \gamma = 1, \delta = 0$  と計算できるので、終状態  $|\psi_f\rangle$  でのハミルトニアン  $H_f$  は、つぎのように書ける。

$$H_f = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{matrix} \leftarrow |00\rangle \\ \leftarrow |01\rangle \\ \leftarrow |10\rangle \\ \leftarrow |11\rangle \end{matrix} \quad (31)$$

この終状態のハミルトニアンの固有値 0 の状態ベクトルは  $|10\rangle$  で、固有値 1 の状態ベクトルは  $|00\rangle, |01\rangle, |11\rangle$  になっていることが分かる。そこで、この終状態  $|\psi_f\rangle$  の観測確率が固有値 0 の基底状態にある状態ベクトル  $|10\rangle$  に 100% 近づけば、解が得られたことになる。

このユニタリ変換  $U_{PS} = e^{-ip(s)H_f}$  は、ハミルトニアン

が対角行列なので、状態ベクトルの位相をシフトする働きがある。この位相シフトのユニタリ変換は、非解は固有値の数値が高いので、その非解の状態ベクトルの位相を大きく変えて、非解の固有値の数値が高いほど大きく回転させ、解は固有値の数値が0なので、解の状態ベクトルは動かないで、解探索での集中化に寄与できているものとする。

#### 4.6 全ハミルトニアン固有値の変化

関数数値勾配推定問題での関数微分の数値勾配が  $\nabla f = 2$  と仮定すれば、 $\alpha = 0, \beta = 0, \gamma = 1, \delta = 0$  と計算できるので、全ハミルトニアンが設定できる。断熱量子計算でのハミルトニアン一般化として、初期状態のハミルトニアン  $H_i$  から終状態のハミルトニアン  $H_f$  への移行で、ステップ・パラメータ  $s$  を用いた非線形拡張できる位相関数  $p(s)$  を用いると、つぎのように書ける。

$$H(s) = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 3+p(s) & p(s)-1 & p(s)-1 & p(s)-1 \\ p(s)-1 & 3+p(s) & p(s)-1 & p(s)-1 \\ p(s)-1 & p(s)-1 & 3-3p(s) & p(s)-1 \\ p(s)-1 & p(s)-1 & p(s)-1 & 3+p(s) \end{pmatrix} \quad (32)$$

このハミルトニアンの固有値方程式  $|H - \lambda I| = 0$  を解いて、エネルギー固有値  $\lambda$  を求めると、つぎのように、4つの固有値  $\lambda_{1,2,3,4}$  が解析的に求まる。

$$\lambda_{1,2,3,4} = 1, 1, \frac{1}{2} [1 \pm \sqrt{1 - 3p(s) + 3p(s)^2}] \quad (33)$$

これらのエネルギー固有値はステップ・パラメータ  $s$  を変化させると、1次関数  $p(s) = s$  と3次関数  $p(s) = 4(s - 0.5)^3 + 0.5$  の場合を考える。どちらの場合も、最も高い一定の固有値1は2重に縮退している。また、どちらの場合も、 $s = 0.5$  で基底状態と励起状態とのエネルギーギャップがもっとも小さくなるが、3次関数の方が長く平坦な状態が継続している。これは、3次関数の方が1次関数よりも強い相互作用が長く働いていることを意味し、ユニタリ変換による状態変化が早く効率的に起こることが期待できる。

#### 4.7 全ハミルトニアンの固有ベクトルの変化

初期ステップ・パラメータ  $s = 0$  のとき、ハミルトニアンの4つの固有ベクトルは、つぎのようになる。

$$\begin{aligned} \lambda = 1 &: \frac{-|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}, \frac{-|00\rangle + |10\rangle}{\sqrt{2}}, \frac{-|00\rangle + |01\rangle}{\sqrt{2}}, \\ \lambda = 0 &: \frac{|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle}{2}. \end{aligned} \quad (34)$$

また、最後のステップ・パラメータ  $s = 1$  のとき、ハミルトニアンの4つの固有ベクトルは、つぎのようになる。

$$\begin{aligned} \lambda = 1 &: |00\rangle, |10\rangle, |11\rangle, \\ \lambda = 0 &: |10\rangle. \end{aligned} \quad (35)$$

そこで、初期の  $s = 0$  で固有値0の基底状態に出来るだけ留まった形で、初期の均等な重ね合わせ状態にある状態ベクトル  $(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle)/2$  からスタートして、何

回かのユニタリ変換を受けて、基底状態と励起状態とで相互作用しながら、それぞれの状態間で確率振幅すなわち占拠数 (population) の移動を引き起こし、非解状態の占拠数を出来るだけ減らし、解状態の占拠数を出来るだけ増やして、遷移させることが可能となる。そして、最後の  $s = 1$  で固有値0の基底状態である  $|10\rangle$  に出来るだけ高い確率で留まったまま発展すればよいことになる。基底状態の状態ベクトルは、つぎのように変化している。

$$\begin{aligned} s = 0 & \rightarrow s = 1 \\ \text{GroundState} &: \frac{|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle}{2} \rightarrow |10\rangle. \end{aligned} \quad (36)$$

そのために、基底状態には、どれだけの確率振幅があるかを計算する必要があり、それをつぎに示そう。

### 5. 断熱量子計算による数値シミュレーション実験と考察

#### 5.1 ユニタリ変換による状態ベクトルの変化

まず、入力する初期状態として2量子ビットだけを用いて、4つの状態ベクトル  $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle$  が均等な確率振幅を持った重ね合わせ状態を準備する。

$$|\psi^{(0)}\rangle = \frac{1}{2} [|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle] \quad (37)$$

そのために、ここにはこの問題のすべての解候補が均等に準備されていて、これを断熱量子計算を工夫して時間発展させることにより、求める解の確率振幅をできるだけ大きくし、欲しくない解の確率振幅をできるだけ小さくすることである。

数値勾配推定問題で数値勾配が  $\nabla f = 2$  と仮定して、状態ベクトルを調べることにする。そうすれば、終状態でのハミルトニアン  $H_f$  は、 $\alpha = 0, \beta = 0, \gamma = 1, \delta = 0$  となり、3次のステップ関数を用いてユニタリ変換を求め、最終的に状態  $|10\rangle$  の観測確率を初期の25%からできるだけ高くすればよいことになる。数値勾配が  $\nabla f = 0, 1, 3$  でも同様にして計算できる。また、よく誤解されるが、最初から解が分かっているのではないかと誤解されるが、どの問題も解が分かっているのではなく、解は計算できることを前提として用いているだけである。

そこで、3次のステップ関数を用いて、式(34)の均等な重ね合わせの初期状態  $|\psi^{(0)}\rangle$  は、ステップ・パラメータ  $s = h/9$  を9回に分けて繰り返して、

$$|\psi^{(9)}\rangle = U^{(9)}U^{(8)}\dots U^{(2)}U^{(1)}|\psi^{(0)}\rangle \quad (38)$$

徐々に変化させて式(25)のユニタリ変換  $U^{(h)}$  で発展させると、4つの状態ベクトルが変化し、複素数が出てくるので、ガウス平面での単位円内に書ける。解  $|10\rangle$  は位相シフト(回転)が少なく、非解は固有値が大きいので位相シフト(回転)が大きく、状態混合の影響で、解の振幅は少しずつ大きくなり、非解の振幅は少しずつ減少していくこと

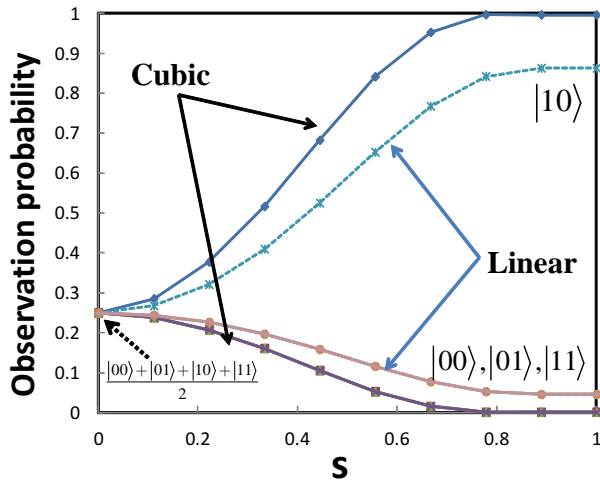


図 1 Observation probabilities  $P^{(h)}$  of four state vectors as a parameter of step parameter  $s$  by adiabatic quantum computation with  $\nabla f = 2$ .

になる。さらに、これを徐々に 9 回まで繰り返せば、ステップ毎に変化し、 $s = 9/9 (h = 9)$  で、最終的な解の状態  $|10\rangle$  だけが生き残ってくることになる。

### 5.2 断熱量子計算における観測確率の変化

このような断熱量子計算における状態ベクトルの変化を、各ステップにおける各状態の観測確率はその確率振幅の絶対値の自乗を取ることによって求められるので、各ステップ  $s = h/9$  での各状態の観測確率  $P^{(h)}$  が計算でき、図 1 のようになった。図 1 では、1 次と 3 次のステップ関数を用いた場合とを比較した。最終的には、解  $|10\rangle$  を観測する確率が、99.6%に増加した。均等な重ね合わせ状態の初期状態  $|\psi^{(0)}\rangle$  から、断熱量子計算を 9 回繰り返すことにより、この最終状態ベクトル  $|\psi^{(9)}\rangle$  を観測すると、状態  $|10\rangle$  が 99.6%の確率で観測されることになる。ステップ  $s = 8/9 (h = 8)$  としても同じく状態  $|10\rangle$  が 99.6%の確率で観測されることになる。この理由は、ステップ  $s = 1$  では、状態混合のユニタリ変換が消えて、確率振幅の混合が行われず、位相シフトのユニタリ変換のみが行われるので、4 つのベクトルがただ回転するだけで、観測確率は不変となるためである。そのために、8 回のユニタリ変換の後に、状態ベクトル  $|\psi^{(8)}\rangle$  を 1 回だけ観測すればよいことになり、断熱量子計算でも関数への問い合わせは 1 回となる。

一方、線形ステップ関数  $p(s) = s$  を利用すると、全く同じ条件でユニタリ変換し、図 1 の破線のように変化し、最終で状態  $|0\rangle$  は 86.27%の確率でしか観測されないことになる。また、2 次のステップ関数  $p(s) = s^2$  や  $p(s) = 2s - s^2$  を利用すると、最終で状態  $|0\rangle$  はそれぞれ 81.05%、81.05%と同じ確率で観測され、線形ステップ関数よりもさらに悪くなった。

## 6. おわりに

断熱量子計算を関数の数値勾配推定問題に初めて適用し、Das ら [4] で使われた線形ステップ関数では収束が遅く、ほぼ 100%近い観測確率を得ることはできず、ここでは、3 次の非線形ステップ関数を提案して、シミュレーション実験を行った。その結果、100%近い高い確率で解が求まることが分かった。今後、この非線形ステップ関数を用いた断熱量子計算で、さらに、2 回微分  $\nabla^2 f$  の数値勾配推定などに適用できるか確かめたい。また、位相スケール因子  $\Delta$  を最適化したり、繰り返し回数  $j$  をできるだけ少なくできないかも、今後の課題としたい。

### 参考文献

- [1] S.P. Jordan: Fast Quantum Algorithm for Numerical Gradient Estimation, Phys. Rev. Lett., Vol.95, 050501 (2005).
- [2] E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann, and M. Sipser: Quantum Computation by Adiabatic Evolution, quant-ph/0001106 (2000).
- [3] T. Hogg: Adiabatic Quantum Computing for Random Satisfiability Problems, quant-ph/0206059 (2002).
- [4] S. Das, R. Kobes, and G. Kunstter: Adiabatic Quantum Computation and Deutsch's Algorithm, quant-ph/0111032 (2001).
- [5] 中山 茂: ドイツ問題における断熱量子計算の研究, 日本計算工学会論文集, Vol.2012, No.P20120011, pp.1-6 (2012).
- [6] S. Nakayama and G. Peng: Study on Adiabatic Quantum Computation in Deutsch-Jozsa Problem, SNPD 2012, Kyoto, Japan Vol.5D (2012).
- [7] E. Bernstein and U. Vazirani: Quantum complexity theory, SIAM Journal on Computing, Vol. 26, No.5, pp. 1411-1473 (1997)
- [8] S. Nakayama, G. Peng, and I. Iimura: Study on Quantum Parallel Processing by Adiabatic Quantum Computation in Bernstein-Vazirani Problem, PDCAT2012, Beijing, China, pp.678-682 (2012).