

# 整数係数・整数変数多項式関数への 勾配推定量子アルゴリズムについての研究

A study of quantum algorithms for gradient estimation of  
integer polynomials

水原慎一<sup>1</sup>，飯山悠太郎<sup>2</sup>，浅井祥二<sup>1</sup>

mizuhara@icepp.s.u-tokyo.ac.jp iiyama@icepp.s.u-tokyo.ac.jp  
shoji.asai@cern.ch

<sup>1</sup> 東京大学大学院理学系研究科物理学専攻

<sup>2</sup> 東京大学素粒子物理国際研究センター

# 目次

導入

Jordan の量子アルゴリズムの Review

新しい量子勾配推定アルゴリズム

シミュレーションと実験結果

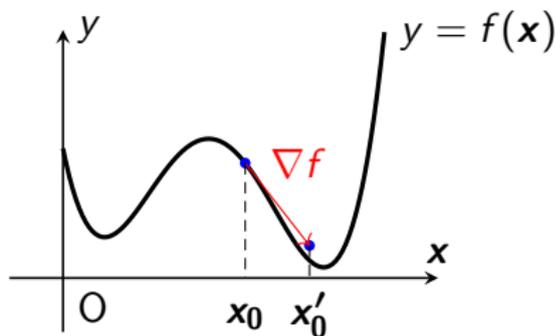
# 導入

# 勾配を用いた最適化

- ▶ 応用先: Fitting、機械学習 etc.
- ▶ 最急降下法による最小化

$$\mathbf{x}_0 \leftarrow \mathbf{x}_0 - \eta \nabla f|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0}$$

where  $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$



- ▶ スケーリングの問題

ex. 局所解、次元の呪い、**勾配自体の計算量**、etc.

## 勾配の古典的クエリ計算量

$$\nabla f|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} = \left( \frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_d} \right)$$

$$\stackrel{\text{1st order}}{\simeq} \left( \frac{f(\mathbf{x}_0 + \delta \mathbf{e}_1) - f(\mathbf{x}_0)}{\delta}, \dots, \frac{f(\mathbf{x}_0 + \delta \mathbf{e}_d) - f(\mathbf{x}_0)}{\delta} \right)$$

where  $\{\mathbf{e}_i\}_{i=1}^d$  : 標準基底

$f(\mathbf{x}_0), f(\mathbf{x}_0 + \delta \mathbf{e}_1), \dots, f(\mathbf{x}_0 + \delta \mathbf{e}_d)$  の値が必要。

$\implies$  古典的には、 $d + 1 = \Omega(d)$  のクエリが少なくとも必要。

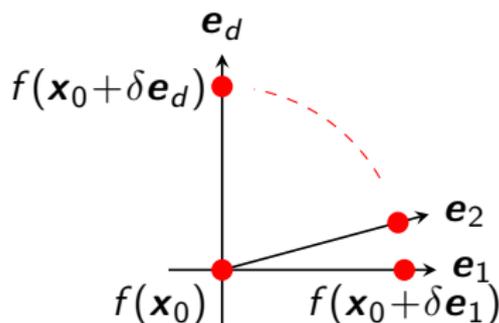


Figure: クエリすべき座標点

# 研究動機

- ▶ 勾配を効率よく計算できるか？
  
  
  
  
  
  
  
  
  
  
- ▶ 実デバイスで勾配に関する量子計算を行い、理論と現実との隔たりを狭める

# 研究動機

- ▶ 勾配を効率よく計算できるか？

⇒ Jordan の勾配推定量子アルゴリズム

⇒ 考案したアルゴリズムと密接に関係するので Review

- ▶ 実デバイスで勾配に関する量子計算を行い、理論と現実との隔たりを狭める

# Jordan の量子アルゴリズムの Review

# Jordan の勾配推定量子アルゴリズム

## First quantum algorithm for gradient estimation

Jordan は関数  $f$  が局所的に線形である仮定で、 $f$  の勾配が  $\mathcal{O}(1)$  の  $f$  のクエリによって推定できることを示した。[1]

# 定義と仮定

## 関数

1.  $d$  変数の実数値関数  $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$
2. 局所的な線形性の仮定

$$f(\mathbf{x} + \delta) = f(\mathbf{x}) + \nabla f \cdot \delta + \mathcal{O}(\|\delta\|^2)$$

( $\delta$  は微小量)

## 位相オラクル

実ベクトル  $\delta$  をエンコードした計算基底状態  $|\delta\rangle$  に対し

$$\begin{aligned} O_{2\pi S f} : |\delta\rangle &\rightarrow \exp(2\pi i S f(\mathbf{x} + \delta)) |\delta\rangle \\ &\simeq \exp(2\pi i S f(\mathbf{x})) \exp(2\pi i S \nabla f \cdot \delta) |\delta\rangle \end{aligned}$$

(あるスケール因子  $S > 0$  とした)

# Jordan のアルゴリズムの手続き

## Quantum gradient estimation

- ▶ 状態の初期化  $|\psi\rangle = \mathcal{N} \sum_{\delta \in G_x^d} |\delta\rangle$

( $x$  近傍の  $d$  次元のグリッドを  $G_x^d$ )

- ▶ 位相オラクル  $O_{2\pi S f}$  を作用

$$O_{2\pi S f} |\psi\rangle = \mathcal{N} \sum_{\delta \in G_x^d} \underbrace{\exp(2\pi i S f(\mathbf{x}))}_{\text{global phase}} \exp(2\pi i S \nabla f \cdot \delta) |\delta\rangle$$

- ▶ 逆量子フーリエ変換を行い状態

$$|s \nabla f\rangle = |s \partial f / \partial x_1\rangle \dots |s \partial f / \partial x_d\rangle$$

を観測する ( $s$  はあるスケール因子)

# 新しい量子勾配推定アルゴリズム

# 勾配推定の新しい手法

## 典型的な手法

不必要な項を微小量として切り落とす

- ▶ 近似 [1]:  $f(\mathbf{x} + \delta) = \cancel{f(\mathbf{x})} + \nabla f \cdot \delta + \cancel{\mathcal{O}(\|\delta\|^2)}$
- ▶ 中心差分と近似 [2]:  $f(\mathbf{x} + \delta) - f(\mathbf{x} - \delta) = 2\nabla f \cdot \delta + \cancel{\mathcal{O}(\|\delta\|^3)}$

## 新しい手法

$2\pi$  の整数倍の位相の対称性から不必要な項を切り落とす

テイラー展開時の係数が整数になる関数  $f$  に対し

$$\exp\left(2\pi i \frac{f(\mathbf{x} + 2^m \delta)}{2^{2m}}\right) = \exp\left(2\pi i \left(\frac{\cancel{f(\mathbf{x})}}{2^{2m}} + \frac{\nabla f \cdot \delta}{2^m} + \cancel{(\text{integer})}\right)\right)$$

# 考案したアルゴリズムの前提と手続き

## 前提

$d$  個の整数変数を持つブラックボックスな整数係数多項式  $f$

$$f : \mathbb{Z}_{2^{2m}}^d \rightarrow \mathbb{Z}$$

## Algorithm

勾配を求める座標  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_d) \in \mathbb{Z}_{2^{2m}}^d$

▶ 入力:  $\mathbf{x} \bmod 2^m \in \mathbb{Z}_{2^m}^d$

▶ 出力:  $\nabla f|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}} \in \mathbb{Z}_{2^m}^d$

▶ クエリ計算量:  $\mathcal{O}(1)$

▶ 手続き

1. 状態の初期化  $|\mathbf{x}\rangle := \bigotimes_{j=1}^d \left( |0\rangle^{\otimes m} |x_j \bmod 2^m\rangle \right)$

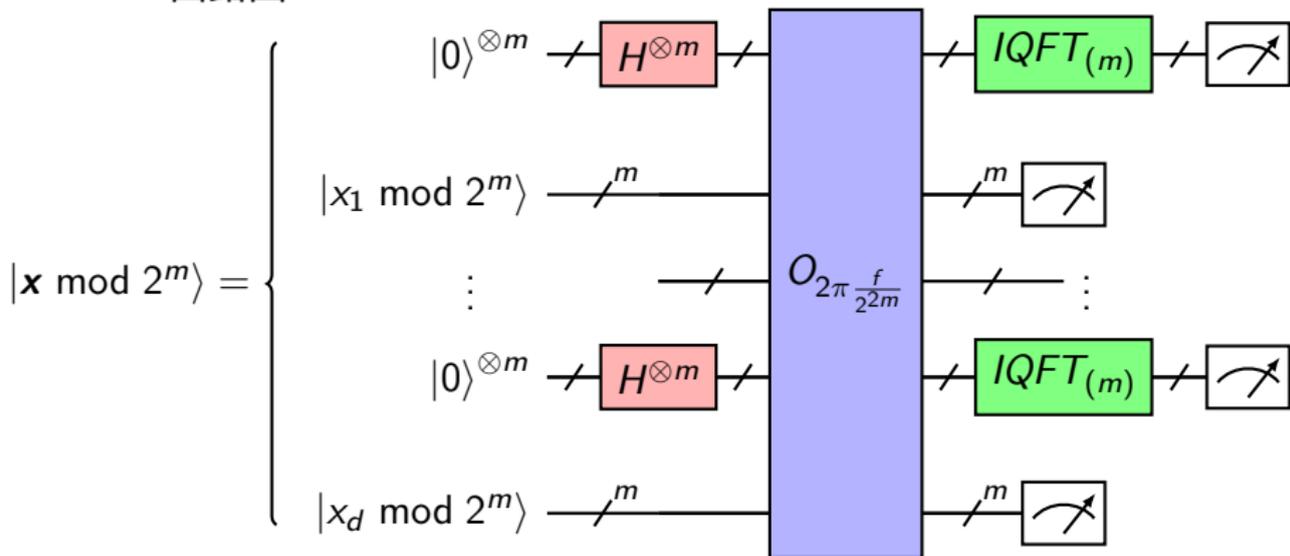
2. 部分的アダマール変換  $\bigotimes_{j=1}^d (H^{\otimes m} \otimes I^{\otimes m})$

3. 位相オラクル  $O_{2\pi f/2^{2m}}$  を作用

4. 部分的逆量子フーリエ変換  $\bigotimes_{j=1}^d (IQFT_{(m)} \otimes I^{\otimes m})$

# アルゴリズムによる状態変化

## ▶ 回路図



## ▶ 終状態

$$\left( \left| \frac{\partial f}{\partial x_1} \right\rangle |x_1 \bmod 2^m\rangle \right) \otimes \dots \otimes \left( \left| \frac{\partial f}{\partial x_d} \right\rangle |x_d \bmod 2^m\rangle \right)$$

# 考案したアルゴリズムの特徴

## 新しい手法

$2\pi$  の整数倍の位相の対称性から unnecessary な項を切り落とす

### 長所

1. クエリ計算量 =  $\mathcal{O}(1)$   
→ 変数の数だけでなく 多項式の次数にも依らない
2. 決定論的な出力分布 → ノイズ耐性があり実験に適する

### 短所

1. 強い仮定
  - ▶ 整数変数・整数係数多項式
  - ▶ 関数がブラックボックス
2. 限られたビット数の  $\nabla f$  の表現  
→  $|\nabla f|$  が十分小さい時にのみ成功する

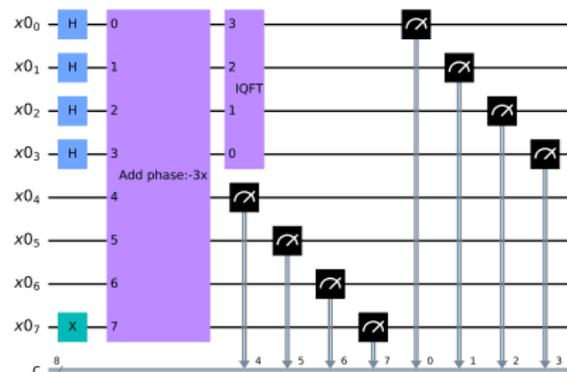
# シミュレーションと実験結果

# 関数の選択と回路図

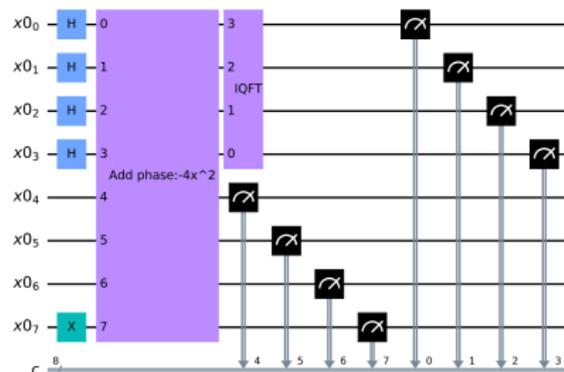
$$\text{関数 } f : \mathbb{Z}_{2^{2m}}^d \rightarrow \mathbb{Z}$$

Exp.1  $f_1(x) = -3x$ ,  $x_0 \equiv 1$ ,  $m = 4$ ,  $d = 1$   
 $\rightarrow \nabla f|_{x=x_0} = -3 \pmod{16}$

Exp.2  $f_2(x) = -4x^2$ ,  $x_0 = 1$ ,  $m = 4$ ,  $d = 1$   
 $\rightarrow \nabla f|_{x=x_0} = -8 \pmod{16}$



(a) Exp.1



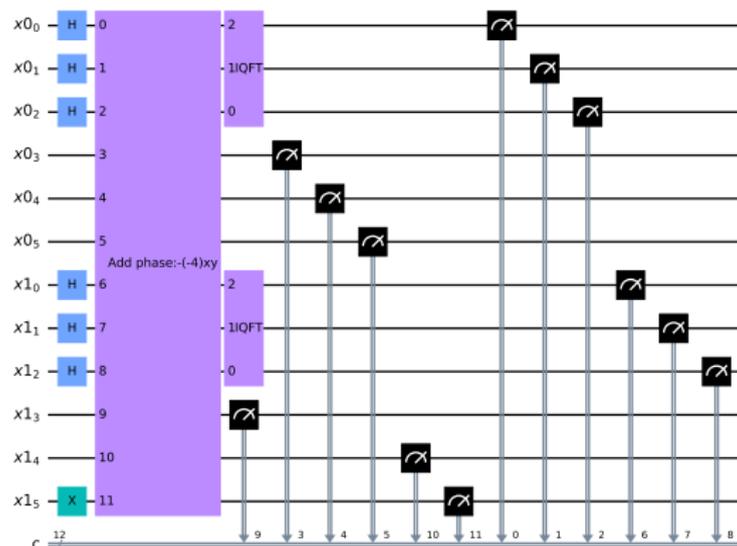
(b) Exp.2

Figure: トランスパイル前の回路図の外観<sup>1</sup>

## 関数の選択と回路図

Exp.3  $f_3(x, y) = 4xy$ ,  $\mathbf{x}_0 = (0, 1)$ ,  $m = 3$ ,  $d = 2$

$\rightarrow \nabla f|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} = (4, 0) \equiv (-4 \bmod 8, 0 \bmod 8)$



(c) Exp.3

Figure: トランスパイル前の回路図の外観<sup>1</sup>

# 実行条件

Qiskit によるノイズ下でのシミュレーション (ref. [here](#))

- ▶ 各量子ビットの各基底ゲートのゲートエラー率
- ▶ 各量子ビットの各基底ゲートのゲート長
- ▶ 各量子ビットの  $T_1, T_2$  緩和時間定数
- ▶ 各量子ビットにおける読み出しエラー率

IBM Quantum による実験

- ▶ Shots 数 = 8192
- ▶ 測定エラー逓減 [3]
- ▶ backend: *ibm\_kawasaki*[4]
- ▶  $\nabla f$  の出力ビット列が反転するように IQFT を変更<sup>1</sup>

	depth	size	# of CNOT
Exp.1	39	75	17
Exp.2	48	165	36
Exp.3	45	232	73

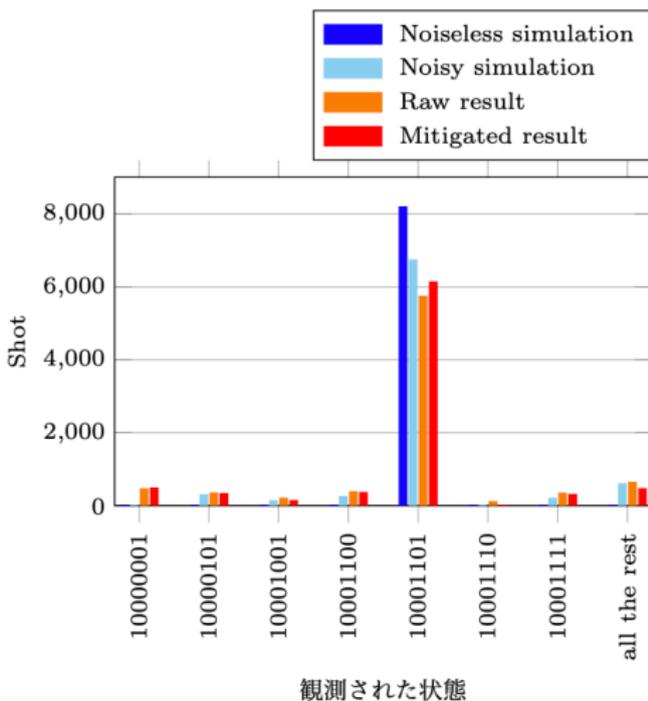
Table: トランスパイル後の量子回路

---

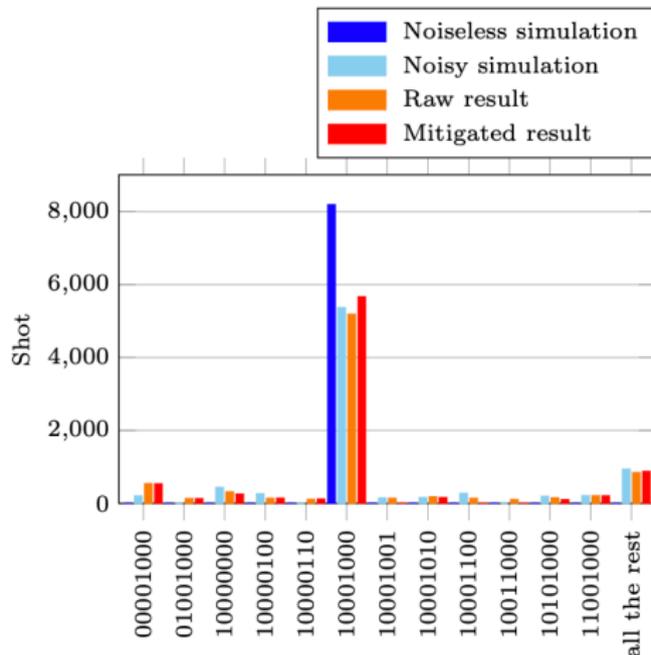
<sup>1</sup>ゲート数を減らすため SWAP 操作を取り除いたものをここでは IQFT と呼んでいる

# 実行結果

閾値 100 shots とする。



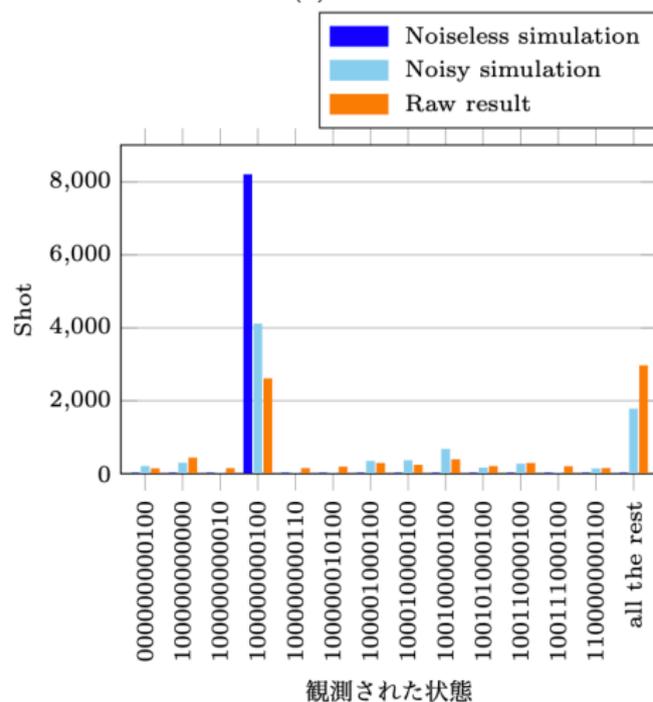
(a) Exp.1



(b) Exp.2

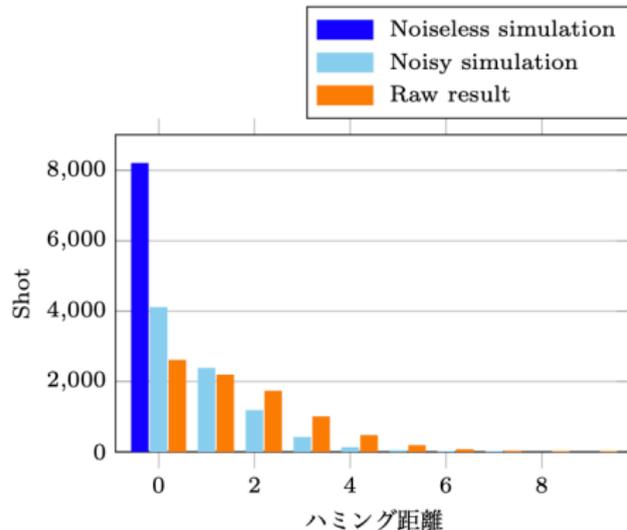
Figure: 観測された状態の分布

# 実行結果



(c) Exp.3

Figure: 観測された状態の分布



(c) Exp.3

Figure: 理想的な出力ビット列に対するハミング距離の分布

# まとめと今後

## まとめ

1. Jordan の勾配推定量子アルゴリズムの紹介
2. 新しい手法を用いた勾配推定量子アルゴリズムの提案
3. シミュレーションと実験による検証

## 今後

1. 数と関数のエンコード方法
2. オラクルの効率的な構成
3. より弱い仮定での量子計算を実機で行う

Back up

# 固定小数点数による数の定義

整数のみを考える。

- ▶  $n$  ビットの2進数表示

$$\begin{aligned}x &= x_1x_2 \dots x_n \\ &= \sum_{j=1}^n x_j 2^{n-j}\end{aligned}$$

$$x \in \{0, 1, \dots, 2^n - 1\}, x_j \in \{0, 1\}$$

- ▶  $n$  ビットの2の補数表示

$$\begin{aligned}x &= x_1x_2 \dots x_n \\ &= -x_1 2^{n-1} + \sum_{j=2}^n x_j 2^{n-j}\end{aligned}$$

$$x \in \{-2^{n-1}, -2^{n-1} + 1, \dots, 2^{n-1} - 1\}, x_j \in \{0, 1\}$$

# 位相オラクルの構成方法

## 位相オラクル

$$O_f |x\rangle = \exp\left(2\pi i \cdot S f(x)\right) |x\rangle$$

( $S$ : スケール因子)

関数が多項式で整数  $x$  が  $n$  ビットの 2 進数表示されているとする

$$O_f \equiv \prod_{j=0} O_{f_j}$$

- ▶  $f_0(x) = a_0$ :  $O_{f_0} \approx (\text{Identity})$
- ▶  $f_1(x) = a_1 x$ :  $O_{f_1} \equiv \prod_j P_j(2\pi S \cdot a_1 \cdot 2^{n-j})$
- ▶  $f_2(x) = a_2 x^2$ :  $O_{f_1} \equiv \prod_{j,k} CP_{j,k}(2\pi S \cdot a_2 \cdot 2^{2n-j-k})$
- ▶ etc.

# バイナリオラクルによる位相オラクルの構成

## バイナリオラクル

$$O_f |\mathbf{x}\rangle |0\rangle = |\mathbf{x}\rangle |f(\mathbf{x})\rangle$$

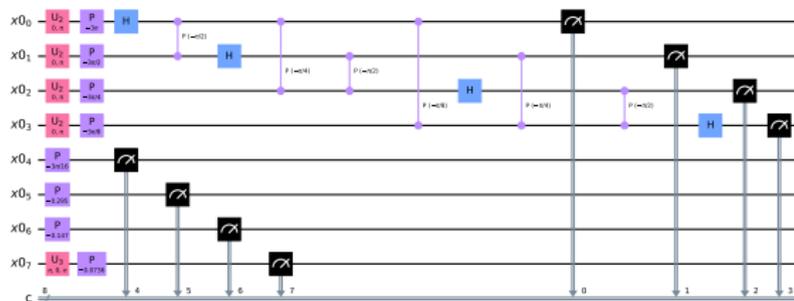
位相オラクルを得るには、 $f(x)$  の各ビットに以下のように位相ゲートを施せば良い。

$$O_f^{-1} \prod_j P_j \left( 2\pi \frac{S}{2^j} \right) O_f |\mathbf{x}\rangle |0\rangle = \exp \left( 2\pi i \cdot S f(\mathbf{x}) \right) |\mathbf{x}\rangle |0\rangle$$

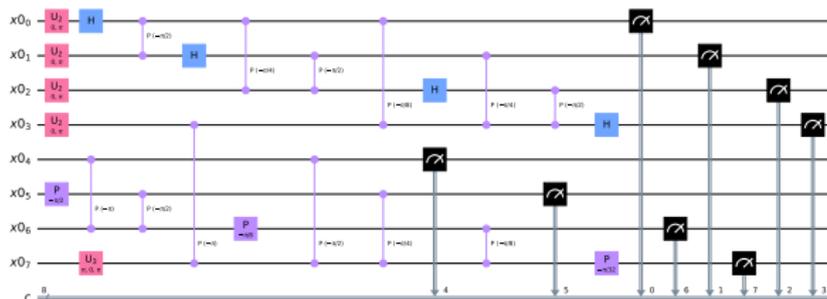
- ▶  $P_j$ :  $f(x)$  の  $j$  番目の量子ビットに作用する位相ゲート
- ▶  $S$ : スケール因子

バイナリオラクル 2 回のクエリで構築できる

# 量子回路



(a) Exp.1



(b) Exp.2

Figure: トランスパイル前の量子回路



## Lemma

$f$  が整数係数多項式で整数変数を持つので Taylor 展開時の多項式の係数は整数であり、また  $\mathbf{x}'_0 - \mathbf{x}_0 = \mathbf{0} \pmod{2^m}$  とすると、

$$\begin{aligned} & f(\mathbf{x}'_0 + 2^m \delta) \\ &= f(\mathbf{x}_0 + (\mathbf{x}'_0 - \mathbf{x}_0) + 2^m \delta) \\ &= f(\mathbf{x}_0) + (\mathbf{x}'_0 - \mathbf{x}_0 + 2^m \delta) \cdot \nabla f|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} + 2^{2m} p(\delta, \mathbf{x}'_0 - \mathbf{x}_0) \\ &= (\text{independent of } \delta) + 2^m \delta \cdot \nabla f|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} + 2^{2m} p(\delta, \mathbf{x}'_0 - \mathbf{x}_0) \end{aligned}$$

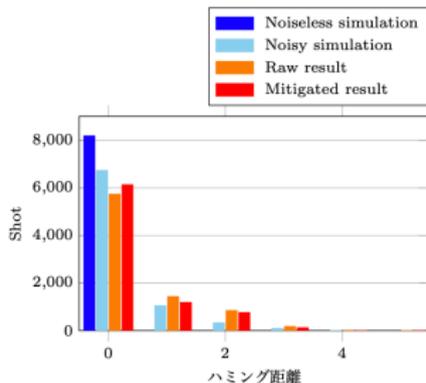
with  $p(\delta, \mathbf{x}'_0 - \mathbf{x}_0)$ :

$\delta, \mathbf{x}'_0 - \mathbf{x}_0$  に関して二次以上で整数値をとる多項式

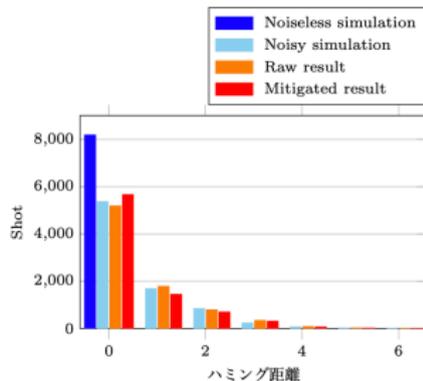
$$\therefore f(\mathbf{x}'_0 + 2^m \delta) \equiv (\text{independent of } \delta) + 2^m \delta \cdot \nabla f|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \pmod{2^{2m}}$$

第一項は大域的位相として無視される。

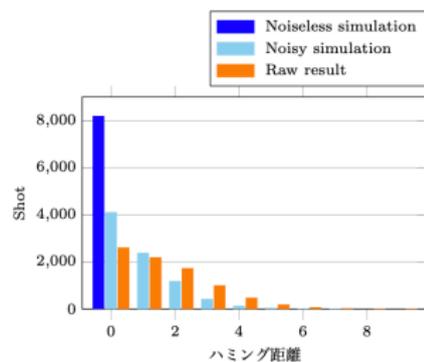
# 実行結果のハミング距離による解析



(a) Exp.1



(b) Exp.2



(c) Exp.3

Figure: 理想的出力ビット列に対するハミング距離の分布

	Noisy simulation	Raw result	Mitigated Result
実験 1	0.240	0.450	0.373
実験 2	0.533	0.586	0.499
実験 3	0.802	1.437	—

Table: 平均ハミング距離

## 参考文献 I

- [1] Stephen P. Jordan.  
Fast quantum algorithm for numerical gradient estimation.  
[Phys. Rev. Lett.](#), 95:050501, Jul 2005.
- [2] András Gilyén, Srinivasan Arunachalam, and Nathan Wiebe.  
Optimizing quantum optimization algorithms via faster quantum gradient computation.  
In [Proceedings of the Thirtieth Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms](#), pages 1425–1444. SIAM, 2019.
- [3] Sergey Bravyi, Sarah Sheldon, Abhinav Kandala, David C. Mckay, and Jay M. Gambetta.  
Mitigating measurement errors in multiqubit experiments.  
[Phys. Rev. A](#), 103:042605, Apr 2021.
- [4] Ibm quantum, 2021.