

# ノイズ下における最適量子振幅推定と適応的測定基底

大塩 耕平<sup>i,ii</sup>, 鈴木 洋一<sup>ii,iii</sup>, 和田 凱渡<sup>iv</sup>, 久永 慶瑚<sup>iv</sup>, 宇野 隼平<sup>v</sup>,  
山本 直樹<sup>ii,iv</sup>

## Adaptive measurement strategy for noisy quantum amplitude estimation with variational quantum circuits

Kohei OSHIO, Yohichi SUZUKI, Kaito WADA, Keigo HISANAGA, Shumpei UNO,  
Naoki YAMAMOTO

量子振幅推定は、量子コンピュータの多様な応用においてその性能を引き出すための鍵となる基盤技術である。一方で、ノイズの影響が避けられない現在の量子デバイス環境下では、既存の手法では理論的に達成可能な最良の推定精度に到達することが出来ない。本稿では、量子推定理論に基づき、測定基底を適応的に最適化することで、ノイズのある量子コンピュータにおける量子振幅推定の推定精度を理論限界まで向上する手法を提示する。

(キーワード): 量子コンピュータ, 量子アルゴリズム, 量子振幅推定

### 1 はじめに

量子コンピュータは物質の量子力学的な振る舞いを利用して情報処理を行う計算機技術であり、従来のコンピュータでは困難な計算タスクの高速な処理が期待されている。多くの量子アルゴリズムでは、ゲート操作後に得られる量子状態の振幅を正確に推定することが重要となる。例えば、量子コンピュータによるモンテカルロ積分アルゴリズム<sup>1)</sup>では、規格化された積分値が振幅にエンコードされ、この値を効率的に推定することで従来のコンピュータを上回る性能を示すことが可能となる。このような背景から、量子状態の振幅を推定する量子アルゴリズムが盛んに研究されている<sup>2)-5)</sup>。特に近年では、NISQ や Early-FTQC といった、ノイズによるエラーを十分に訂正できない量子コンピュータにおいても高精度な振幅推定を実現するため、ノイズモデルを取り入れたアル

ゴリズムが提案されている<sup>6)-9)</sup>。

本稿では、ノイズによるエラーを無視できない状況において推定精度を改善する量子振幅推定アルゴリズム<sup>10)</sup>を紹介する。従来のアルゴリズムには、ノイズの発生頻度が分からなければエラーの影響を限界まで緩和することができないという課題があった。本アルゴリズムは、量子推定理論という量子系のパラメータ推定に関する理論に基づいて測定基底を最適化することで、ノイズの発生頻度が未知の場合でも理論的限界に近い推定精度を達成できる。また、このアルゴリズムは特許(第7512486号)を取得済みであり、量子振幅推定の多様な応用分野での性能向上が期待される。

本稿の構成は以下のとおりである。まず2章において量子振幅推定や量子 Cramér-Rao 下限などの基礎的な概念について簡単に説明する。次に、3章において、測定基底を最適化する量子振幅推定アルゴリズム

<sup>i</sup> サイエンスソリューション部 デジタルエンジニアリングチーム シニアコンサルタント

<sup>ii</sup> 慶應義塾大学 量子コンピューティングセンター

<sup>iii</sup> 産業技術総合研究所 量子・AI 融合技術ビジネス開発グローバル研究センター

<sup>iv</sup> 慶應義塾大学 理工学部 物理情報工学科

<sup>v</sup> サイエンスソリューション部 デジタルエンジニアリングチーム 課長 博士(理学)

ムの詳細と数値実験の結果を示す。最後に、4章でまとめと今後の展望について述べる。

## 2 理論的背景

本章では、理論的な背景として、まず量子振幅推定の問題設定を具体的に示し、これに基づく効率的な推定アルゴリズムの特徴について解説する。次に、量子 Cramér-Rao 下限などの量子推定理論に関わる重要な概念について述べる。なお、ゲート操作(演算子)などの量子計算に関する基礎的な概念については標準的参考書を参照されたい<sup>1)</sup>。

### 2.1 量子振幅推定

本稿で議論する量子振幅推定は、次式で定義される演算子  $A$  が与えられたときに、 $n+1$ 量子ビットの量子状態の振幅に埋め込まれる値  $\theta \in [0, \pi/2]$  を推定するという問題である。

$$A: A|0\rangle_{n+1} = |\psi(\theta)\rangle_{n+1} \\ = \cos \theta |\psi_0\rangle_n |0\rangle + \sin \theta |\psi_1\rangle_n |1\rangle \quad (1)$$

$\theta$  を推定する一つの方法として、量子状態  $|\psi(\theta)\rangle_{n+1}$  を計算基底で繰り返し測定し、最後の 1-qubit (補助量子ビット) が  $|1\rangle$  となる確率  $\sin^2 \theta$  を推定する、というものが考えられる。補助量子ビットの観測結果を確率変数  $x \in \{0,1\}$  とすると、 $x$  はベルヌーイ分布に従い、 $x$  の推定誤差は(推定誤差)  $= \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{\text{測定回数}}}\right)$  となる。一般に量子振幅推定アルゴリズムの性能を評価する上では、 $A$  と  $A^\dagger$  ( $\dagger$  はエルミート共役を意味する) を使用する回数  $N$  と、推定における誤差の係数に注目する。 $|\psi(\theta)\rangle_{n+1}$  を用意するために  $A$  を 1 回使用するの、上記の単純な推定手法は(推定誤差)  $= \mathcal{O}(1/\sqrt{N})$  というスケールングを達成することになる。これに対し、より効率的な量子振幅推定アルゴリズムとして、 $A$  から構成される Grover 演算子  $G$  を用いて振幅を増幅する手法が提案されている<sup>2)</sup>。Grover 演算子  $G$  は次式で定義される。

$$G := AS_0A^\dagger S_f \quad (2)$$

ここで、 $S_0 = -I_{n+1} + 2|0\rangle_{n+1}\langle 0|_{n+1}$ ,  $S_f = -I_{n+1} + 2I_n \otimes |0\rangle\langle 0|$  であり、 $I$  は恒等演算子である。 $G$  を

$|\psi(\theta)\rangle_{n+1}$  に  $m$  回作用させることで、次式のように  $\theta$  を  $M := 2m + 1$  倍に増幅した状態を作ることができる。

$$G^m |\psi(\theta)\rangle_{n+1} = \cos[(2m+1)\theta] |\psi_0\rangle_n |0\rangle \\ + \sin[(2m+1)\theta] |\psi_1\rangle_n |1\rangle \quad (3) \\ =: |\psi(M\theta)\rangle_{n+1}$$

このような振幅増幅の操作を用いて  $\theta$  の推定を行うことで、前述の単純な推定方法よりも二次的に良い(推定誤差)  $= \mathcal{O}(1/N)$  というスケールングを達成できる<sup>2)</sup>。なお、ここでは推定誤差として推定量  $\hat{\theta}$  と真値  $\theta$  の差である additive error:  $|\hat{\theta} - \theta|$  を評価しており、2.2 節以降で議論される root mean squared error:

$\sqrt{\mathbb{E}[(\hat{\theta} - \theta)^2]}$  とは異なる点に注意が必要である。

### 2.2 最尤推定を用いた量子振幅推定アルゴリズム

以下では、本稿で述べる手法のベースとなる「最尤推定を用いた量子振幅推定アルゴリズム<sup>3)</sup> (MLAE: maximum likelihood amplitude estimation)」について説明する。MLAE では、以下の (i), (ii) の処理により  $\theta$  を推定する。

(i) 次の処理を  $k = 0, 1, \dots, K$  で実行する:  $G$  を作用させる回数  $m_k$  を、 $k = 0$  の場合は  $m_0 = 0$ 、 $k \geq 1$  の場合は  $m_k = 2^{k-1}$  とし、 $G^{m_k} |\psi(\theta)\rangle_{n+1}$  に対して  $N_s$  回の測定を実行し、 $n+1$  番目の量子ビット (補助量子ビット) が  $|0\rangle$  となる回数  $h_k$  を記録する。

(ii) 次に、次式の尤度関数  $f_L$  が最大となる  $\theta$  を推定量  $\hat{\theta}$  とする ( $\hat{\theta} = \underset{\theta}{\operatorname{argmax}} f_L(\theta; \mathbf{h})$ )。

$$f_L(\theta; \mathbf{h}) \\ = \prod_{k=0}^K [\Pr(0; \theta, m_k)]^{h_k} [\Pr(1; \theta, m_k)]^{N_s - h_k} \quad (4)$$

ここで、 $\mathbf{h} := (h_0, h_1, \dots, h_K)$  である。 $\Pr(0; \theta, m_k)$  と  $\Pr(1; \theta, m_k)$  は  $\theta$  が  $M_k := 2m_k + 1$  倍に増幅された状態  $|\psi(M_k \theta)\rangle_{n+1}$  の測定で補助量子ビットが  $|0\rangle$  と  $|1\rangle$  である確率を表し、 $\Pr(0; \theta, m_k) = \cos^2(2m_k + 1)\theta$ 、 $\Pr(1; \theta, m_k) = \sin^2(2m_k + 1)\theta$  である。

続いて、MLAE の推定誤差について述べる。一般に不偏推定量の分散は Cramér-Rao 不等式<sup>13)</sup> を満たすことから、MLAE の mean squared error (MSE) について次の不等式が成り立つ。

$$\mathbb{E}[(\hat{\theta} - \theta)^2] \geq \frac{1}{F_c(\theta)} = \frac{1}{4N_s \sum_{k=0}^K (2m_k + 1)^2} \geq \frac{1}{4N_s N_A^2} \quad (5)$$

ここで、 $N_A = \sum_{k=0}^K (2m_k + 1)$  である。 $F_c(\theta)$  は  $F_c(\theta) = \mathbb{E}\left[\left(\frac{\partial}{\partial \theta} \ln f_L(\theta; \mathbf{h})\right)^2\right]$  と定義される (古典) Fisher 情報量であり、前述の MLAE の手順 (i) で得られる  $\theta$  に関する情報の量を表す。式(5)の最初の不等式が示す推定精度の下限は Cramér-Rao 限界 (CRB) と呼ばれる理論的な推定精度の下限である。MLAE は漸近的に ( $N_s \rightarrow \infty$  の極限で) CRB を達成できる<sup>3)</sup>。 $G$  は  $A$  と  $A^\dagger$  を1回ずつ用いるため、 $|\psi(M_k \theta)\rangle_{n+1} = G^m A |0\rangle_{n+1}$  を用意するためには  $A$  と  $A^\dagger$  を  $N_A$  回実行すればよい。したがって、式(5)の  $N_A$  のみに注目すると、MLAE は 2.1 節で述べた  $\sqrt{\mathbb{E}[(\hat{\theta} - \theta)^2]} = \mathcal{O}(1/N_A)$  というスケールリングを漸近的に達成できることがわかる。

### 2.3 ノイズ下での MLAE (Noisy MLAE)

近々で利用できる量子コンピュータは、外部ノイズなどによって発生するエラーを訂正する十分な能力を持っていない。このため、ノイズによるエラーが存在する状況でも正常に動作する量子アルゴリズムを設計することが重要となる。以下では、Depolarizing ノイズと呼ばれる、量子状態を完全混合状態 (すべての状態が等確率で混在した状態) に置き換えるノイズモデル<sup>11)</sup>を仮定し、ノイズ下での MLAE (Noisy MLAE)<sup>9)</sup>について議論する。なお、以降の文章では Depolarizing ノイズをノイズと表記する。MLAE において、Grover 演算子  $G$  を作用させたときに一定の確率  $1 - p$  でノイズが加わると仮定すると、 $|\psi(\theta)\rangle_{n+1}$  に  $G$  を  $m_k$  回作用させた状態は次式で与えられる。

$$\rho_{m_k}(\theta, p) = p^{m_k} |\psi(M\theta)\rangle\langle\psi(M\theta)| + (1 - p^{m_k}) \frac{I_{n+1}}{d} \quad (6)$$

ノイズが生じた場合は完全混合状態となり、補助量子ビットは  $|0\rangle$  と  $|1\rangle$  が  $1/2$  の確率で観測される。これにより、通常の MLAE を実行すると  $p$  に依存して  $\theta$  の推定にバイアスが生じる。この場合でも、 $p$  を推定できれば、ノイズによるバイアスを差し引いて  $\theta$  を推定することができる<sup>9)</sup>。具体的には、 $\theta, p$  を変数とする二次元の尤度関数  $f_L(\theta, p; \mathbf{h})$  を構成し、 $\theta$  と  $p$  を同時に推定する。この時の推定精度 (MSE) の下

限は次式で与えられる。

$$\mathbb{E}[(\hat{\theta} - \theta)^2] \geq [F_c^{-1}(\theta, p)]_{\theta, \theta} \quad (7)$$

ここで、 $F_c(\theta, p)$  は Fisher 情報行列と呼ばれる、 $\theta, p$  に対応した要素を持つ  $2 \times 2$  の行列である。 $F_c(\theta, p)$  のパラメータ  $i, j \in \{\theta, p\}$  に対応する行列要素は  $[F_c(\theta, p)]_{i, j} = \mathbb{E}\left[\left(\frac{\partial}{\partial i} \ln f_L(\theta, p; \mathbf{h})\right) \left(\frac{\partial}{\partial j} \ln f_L(\theta, p; \mathbf{h})\right)\right]$  と表される。式(7)から、この時の CRB は Fisher 情報行列  $F_c(\theta, p)$  の逆行列の  $(\theta, \theta)$  成分に等しい。重要な点として、 $p$  が既知で  $\theta$  のみを推定する場合の CRB は  $[F_c(\theta, p)]_{\theta, \theta}^{-1}$  となる。詳細な表式は省くが、 $F_c(\theta, p)$  は非対角成分に値を持つため<sup>6)</sup>、 $[F_c^{-1}(\theta, p)]_{\theta, \theta} > [F_c(\theta, p)]_{\theta, \theta}^{-1}$  であり、 $p$  が未知の場合の CRB は  $p$  が既知の場合の CRB よりも悪くなる。 $F_c(\theta, p)$  の非対角成分が  $0$  にならないのは、 $p$  という余計なパラメータ (Nuisance parameter) の推定が  $\theta$  の推定に影響するためである。

### 2.4 量子 Fisher 情報行列と量子 Cramér-Rao 下限

式(7)に示した Noisy MLAE の推定精度の下限は、量子状態  $\rho_{m_k}(\theta, p)$  を計算基底で測定した場合の Fisher 情報行列に基づいて定められる。量子振幅推定のように量子状態に埋め込まれたパラメータを推定する問題においては、測定基底に依存しない推定精度の下限—量子 Cramér-Rao 限界 (QCRB) を考えることができる<sup>14)-16)</sup>。一般に、量子状態  $\rho(\xi)$  に埋め込まれたパラメータ  $\xi = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{N_{\text{param}}})$  の推定において、QCRB は次式で与えられる。

$$\mathbb{E}[(\hat{\xi}_i - \xi_i)^2] \geq \frac{1}{N_s} [F_q^{-1}]_{\xi_i, \xi_i} \quad (8)$$

ここで、 $F_q(\xi)$  は Symmetric Logarithmic Derivative (SLD) 量子 Fisher 情報行列と呼ばれ、その各要素は次式で定義される。

$$[F_q(\xi)]_{\xi_i, \xi_j} = \frac{1}{2} \text{Tr} \left[ \rho(\xi) (L_{\xi_i} L_{\xi_j} + L_{\xi_j} L_{\xi_i}) \right] \quad (9)$$

$L_{\xi_i}$  は SLD 演算子と呼ばれ、次式で定義される。

$$\frac{\partial \rho(\xi)}{\partial \xi_i} = \frac{1}{2} [\rho(\xi) L_{\xi_i} + L_{\xi_i} \rho(\xi)] \quad (10)$$

$\xi_i$  の推定において QCRB を達成するためには、次式で定義される演算子  $\bar{L}_{\xi_i}$  の固有ベクトルを測定基底とすればよいことが知られている<sup>17)</sup>。

$$\bar{L}_{\xi_i} = \sum_{j=1}^{N_{\text{param}}} [F_q^{-1}(\xi)]_{\xi_j, \xi_i} L_{\xi_j} \quad (11)$$

ただし、一般に  $\bar{L}_{\xi_i}$  は  $\xi_i$  以外の未知パラメータにも依存しており、最適な測定基底を実装することは困難である。

ノイズによるエラーが無い場合、MLAE は QCRB を漸近的に達成しうる<sup>18)</sup>。これは、計算基底が QCRB を達成する最適な測定基底であることを意味する。しかし、ノイズによるエラーがある場合は、計算基底は最適ではなくなり、QCRB を達成できない<sup>18)</sup>。これに対し、MLAE を改良して QCRB を達成する手法が提案されている<sup>18), 19)</sup>。ただし、これらの手法ではノイズの発生確率  $1-p$  が既知と仮定している。実用上、ノイズの発生確率は未知であるため、そのような場合にも QCRB を達成できるかが課題となっていた。

### 3 測定基底の最適化による推定精度改善

以下では、ノイズの発生確率  $1-p$  が未知であると仮定し、MLAE で QCRB に近い精度を達成するアルゴリズム<sup>10)</sup>を提示する。

#### 3.1 Noisy MLAE における最適な測定基底

この手法では、Noisy MLAE における最適な測定基底を近似的に構成することで QCRB に近い精度を達成する。この節では、まず、Noisy MLAE における最適な測定基底を導出する。式(6), (9)から、Noisy MLAE における SLD 演算子は次式となる。

$$L_\theta = \frac{2dM^2 p^{2m_k}}{2 + (d-2)p^{2m_k}} \times \begin{bmatrix} -\sin 2M\theta & \cos 2M\theta & 0 \dots \\ \cos 2M\theta & \sin 2M\theta & 0 \dots \\ 0 & 0 & 0 \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \quad (12)$$

$$L_p = \frac{dm_k p^{m_k-1}}{\{1 + (d-1)p^{m_k}\}(1-p^{m_k})} \times \begin{bmatrix} \cos^2 M\theta & \sin M\theta \cos M\theta & 0 \dots \\ \sin M\theta \cos M\theta & \sin^2 M\theta & 0 \dots \\ 0 & 0 & 0 \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ -\frac{m_k p^{m_k-1}}{1-p^{m_k}} & l_{n+1} & \dots \end{bmatrix} \quad (13)$$

ただし、 $p-1 \neq 0$  (ノイズはゼロではない) と仮定している。量子 Fisher 情報行列  $F_q(\theta, p)$  は、SLD 演算子  $L_\theta, L_p$  を用いて次式のように導出される。

$$F_q(\theta, p) = \begin{bmatrix} [F_q(\theta, p)]_{\theta, \theta} & [F_q(\theta, p)]_{\theta, p} \\ [F_q(\theta, p)]_{p, \theta} & [F_q(\theta, p)]_{p, p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{4dM^2 p^{2m_k}}{2 + (d-2)p^{2m_k}} & 0 \\ 0 & [F_q(\theta, p)]_{p, p} \end{bmatrix} \quad (14)$$

なお、 $(p, p)$ 成分は以降の議論に関係しないため省略している。 $\theta$  の推定における量子 Cramér-Rao 不等式は次式となる。

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[(\hat{\theta} - \theta)^2] &\geq \frac{1}{N_s} [F_q^{-1}(\theta, p)]_{\theta, \theta} \\ &= \frac{1}{N_s} \times \frac{1}{[F_q(\theta, p)]_{\theta, \theta}} \\ &= \frac{1}{N_s} \times \frac{2 + (d-2)p^{2m_k}}{4dM^2 p^{2m_k}} \end{aligned} \quad (15)$$

式(15)が示す通り、この場合の QCRB は  $F_q(\theta, p)$  の  $(\theta, \theta)$ 成分の逆数に依存し、 $p$  が既知で  $\theta$  のみを推定する場合の QCRB と等しい。これは、今回の量子 Fisher 情報行列が対角行列であり、(漸近的には)  $p$  の推定が  $\theta$  の推定に影響を与えないためである。

2.4 で述べたように、QCRB を達成する最適な測定基底は  $\bar{L}_{\xi_i}$  の固有ベクトルで与えられる。今回の場合は  $\bar{L}_\theta = [F_q^{-1}(\theta, p)]_{\theta, \theta} L_\theta$  であり、次式が最適な測定基底となる。

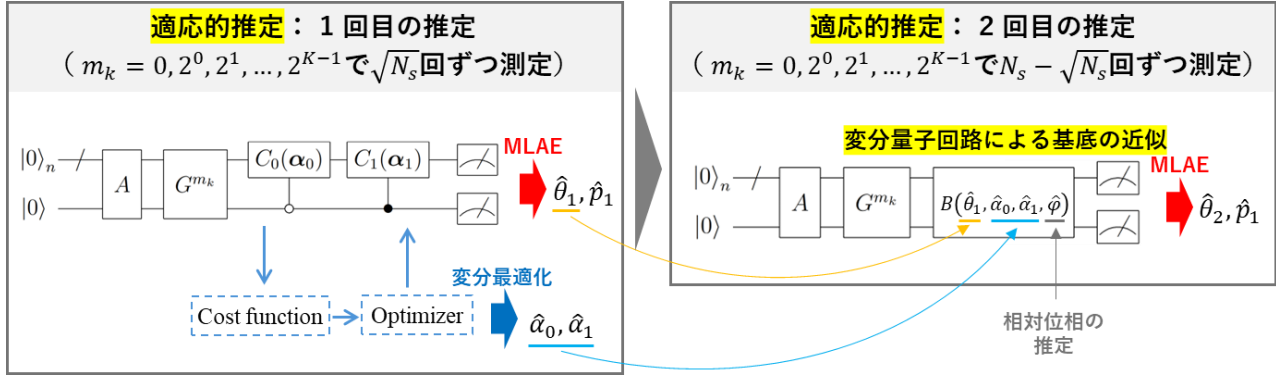


図 1 提案手法の全体像

$$\begin{aligned}
 |\lambda_0(\theta)\rangle_{n+1} &= \cos\left(M\theta + \frac{\pi}{4}\right) |\psi_0\rangle_n |0\rangle \\
 &\quad + \sin\left(M\theta + \frac{\pi}{4}\right) |\psi_1\rangle_n |1\rangle \\
 |\lambda_1(\theta)\rangle_{n+1} &= -\sin\left(M\theta + \frac{\pi}{4}\right) |\psi_0\rangle_n |0\rangle \\
 &\quad + \cos\left(M\theta + \frac{\pi}{4}\right) |\psi_1\rangle_n |1\rangle \\
 |\lambda_l\rangle_{n+1} &\text{ for } l \in \{2, 3, \dots, 2^{n+1} - 1\}
 \end{aligned} \tag{16}$$

ここで、 $|\lambda_l\rangle_{n+1}$  は互いに直交する基底である。

### 3.2 適応的な測定基底最適化

前節で Noisy MLAE における最適な測定基底を導出したが、この基底での測定を実現することは単純には困難である。これは、 $|\lambda_0(\theta)\rangle_{n+1}$ 、 $|\lambda_1(\theta)\rangle_{n+1}$  が未知のパラメータ  $\theta$  と未知の量子状態  $|\psi_0\rangle_n$ 、 $|\psi_1\rangle_n$  に依存していることが理由である。以下では、この問題を解決し、測定基底を最適化することで QCRB に近い推定精度を達成する手法について説明する。

図 1 に提案手法の全体像を示す。この手法は「適応的推定」と「変分量子回路による基底の近似」という二つの手法によって構成されており、3.2.1 項と 3.2.2 項でそれぞれの手法について説明する。

#### 3.2.1 適応的推定

$|\lambda_0(\theta)\rangle_{n+1}$ 、 $|\lambda_1(\theta)\rangle_{n+1}$  が未知のパラメータ  $\theta$  に依存しているという問題にアプローチするために、量子推定理論において提案されている適応的推定 (Adaptive measurement) と呼ばれる手法を用いる<sup>20)</sup>。この手法は、推定を 2 段階に分け、最初にラフにパラメータを推定し、2 回目の推定ではその推定値を用いて測定基底を最適化する、という手法である。このような 2 段階の推定により、漸近的に QCRB を達成できることが証明されている<sup>20), 21)</sup>。

具体的な手順としては、1 回目の推定では、測定回数を  $\sqrt{N_s}$  回として MLAE で  $\theta$  を推定し、2 回目の推定では、1 回目の推定値  $\hat{\theta}_1$  を用いて測定基底を最適化し、測定回数を  $N_s - \sqrt{N_s}$  回として再度 MLAE で  $\theta$  を推定する。2 回目の推定では、式(16)の基底に  $\theta = \hat{\theta}_1$  を代入して得られる測定基底  $|\lambda_0(\hat{\theta}_1)\rangle_{n+1}$ 、 $|\lambda_1(\hat{\theta}_1)\rangle_{n+1}$ 、 $\{|\lambda_l\rangle_{n+1}\}$  を用いた測定を行う。 $\rho_{m_k}(\theta, p)$  に対する測定で上記の測定基底に対応する結果が得られる確率は次式で与えられる。

$$\begin{aligned}
 \Pr(\lambda_0; \theta, p, m_k) &= p^{m_k} \frac{1 + \sin 2M(\theta - \hat{\theta}_1)}{2} \\
 &\quad + \frac{1 - p^{m_k}}{d} \\
 \Pr(\lambda_1; \theta, p, m_k) &= p^{m_k} \frac{1 - \sin 2M(\theta - \hat{\theta}_1)}{2} \\
 &\quad + \frac{1 - p^{m_k}}{d} \\
 \Pr(\lambda_l; \theta, p, m_k) &= \frac{1 - p^{m_k}}{d} (d - 2)
 \end{aligned} \tag{17}$$

この確率に基づき、2.3 節で述べた手順と同様に、二次元の尤度関数  $f_L(\theta, p; \mathbf{h})$  を構成し、最尤推定によって推定量  $\hat{\theta}_2$  を得る。測定基底  $|\lambda_0(\hat{\theta}_1)\rangle_{n+1}$ 、 $|\lambda_1(\hat{\theta}_1)\rangle_{n+1}$ 、 $\{|\lambda_l\rangle_{n+1}\}$  が正しく実装できれば、 $\hat{\theta}_2$  は漸近的に QCRB を達成することが期待される。ただし、前述の通り  $|\lambda_0(\theta)\rangle_{n+1}$ 、 $|\lambda_1(\theta)\rangle_{n+1}$  は未知の量子状態  $|\psi_0\rangle_n$ 、 $|\psi_1\rangle_n$  に依存しており、単純には実装できない。この問題を解決する手法を次の 3.2.2 項で説明する。

#### 3.2.2 変分量子回路による基底の近似

$|\lambda_0(\theta)\rangle_{n+1}$ 、 $|\lambda_1(\theta)\rangle_{n+1}$  が未知の量子状態  $|\psi_0\rangle_n$ 、 $|\psi_1\rangle_n$  に依存しているという問題を解決するために、ここでは変分量子回路を用いて  $|\psi_0\rangle_n$ 、 $|\psi_1\rangle_n$  を近似的に実現するという手法を取る。

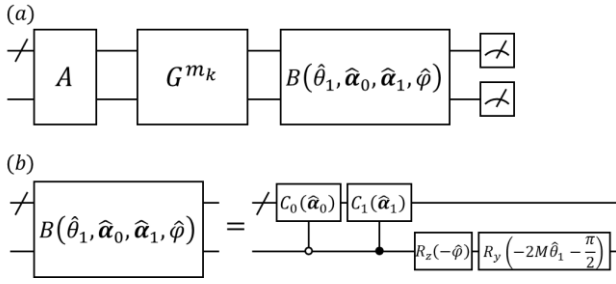


図 2 提案手法で用いる量子回路

まず、図 2 (a) のように  $\rho_{m_k}(\theta, p)$  に対して演算子  $B(\hat{\theta}_1, \hat{\alpha}_0, \hat{\alpha}_1, \hat{\phi})$  を作用させ、測定基底を調整することを考える。ここで、演算子  $B(\hat{\theta}_1, \hat{\alpha}_0, \hat{\alpha}_1, \hat{\phi})$  は次式を満たす。

$$\begin{aligned} B(\hat{\theta}_1, \hat{\alpha}_0, \hat{\alpha}_1, \hat{\phi})|\lambda_0(\theta)\rangle_{n+1} &= |0\rangle_n|0\rangle \\ B(\hat{\theta}_1, \hat{\alpha}_0, \hat{\alpha}_1, \hat{\phi})|\lambda_1(\theta)\rangle_{n+1} &= |0\rangle_n|1\rangle \end{aligned} \quad (18)$$

$\hat{\alpha}_0, \hat{\alpha}_1, \hat{\phi}$  の詳細は後に述べる。  $B(\hat{\theta}_1, \hat{\alpha}_0, \hat{\alpha}_1, \hat{\phi})$  による基底の変換を考えた時、  $\{|\lambda_l\rangle_{n+1}\}$  は  $|0\rangle_n|0\rangle$  と  $|0\rangle_n|1\rangle$  に直交するすべての計算基底と対応する。

$B(\hat{\theta}_1, \hat{\alpha}_0, \hat{\alpha}_1, \hat{\phi})$  は図 2 (b) のように 4 つの演算子  $C_0(\hat{\alpha}_0), C_1(\hat{\alpha}_1), R_z(\hat{\phi}), R_y(\hat{\theta}_1)$  に分解することができる。  $R_z(\hat{\phi}), R_y(\hat{\phi})$  は 1 量子ビットの回転演算子であり、パウリ演算子  $Y, Z$  を用いて  $R_y(\hat{\phi}) = \exp(-i\frac{\hat{\phi}}{2}Y), R_z(\hat{\phi}) = \exp(-i\frac{\hat{\phi}}{2}Z)$  と表せる。

$C_0(\hat{\alpha}_0), C_1(\hat{\alpha}_1)$  は変分パラメータ  $\alpha_0, \alpha_1$  に依存する演算子であり、一般には変分量子回路と呼ばれる。なお、  $\hat{\alpha}_0, \hat{\alpha}_1$  は後述の最適化を行った後に得られる変分パラメータを意味する。  $\alpha_0, \alpha_1$  が最適な場合 ( $\alpha_0 = \alpha_{0,\text{opt}}, \alpha_1 = \alpha_{1,\text{opt}}$ )、図 2 (b) のように  $C_0(\hat{\alpha}_0), C_1(\hat{\alpha}_1)$  を補助量子ビットによって制御した演算子  $cC_0(\alpha_0), cC_1(\alpha_1)$  は次式を満たす。

$$\begin{aligned} cC_1(\alpha_{1,\text{opt}})cC_0(\alpha_{0,\text{opt}})\{\cos M\theta |\psi_0\rangle_n|0\rangle \\ + \sin M\theta |\psi_1\rangle_n|1\rangle\} \\ = \cos M\theta |0\rangle_n|0\rangle + \sin M\theta |0\rangle_n|1\rangle \end{aligned} \quad (19)$$

$C_0(\alpha_0), C_1(\alpha_1)$  には、一般に変分量子回路で利用されている量子回路が利用できる。ただし、前述のとおり、  $C_0(\alpha_0), C_1(\alpha_1)$  は補助量子ビットによって制御された演算として実装しなければならない点に注意が必要である。  $C_0(\alpha_0), C_1(\alpha_1)$  を最適化するために、3.2.1 項で述べた 1 回目の  $\theta$  の推定において図 1 左の量子

回路を実行し、次式のコスト関数  $f_{\text{cost}}(\alpha_0, \alpha_1)$  を計算する。

$$\begin{aligned} f_{\text{cost}}(\alpha_0, \alpha_1) \\ = \sum_{m_k} \text{Tr}[O_L cC_1(\alpha_1) cC_0(\alpha_0) |\psi(M_k\theta)\rangle \\ \langle \psi(M_k\theta) | cC_1^\dagger(\alpha_1) cC_0^\dagger(\alpha_0)] \end{aligned} \quad (20)$$

$$O_L = I_{n+1} - \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n |0\rangle\langle 0|_j \otimes I_j$$

ここで、  $I_j$  は  $j$  番目の量子ビット以外への恒等演算子である。このコスト関数  $f_{\text{cost}}(\alpha_0, \alpha_1)$  は、  $cC_1(\alpha_1)cC_0(\alpha_0)|\psi(M_k\theta)\rangle$  を計算基底で測定し、補助量子ビット以外の量子ビットが  $|1\rangle$  となる回数をカウントし、コストとしている。変分パラメータ  $\alpha_0, \alpha_1$  の各要素  $\alpha_i$  に対する勾配を parameter-shift rule<sup>22),23)</sup> で計算することができるため、標準的な勾配降下法を用いて  $\alpha_0, \alpha_1$  を更新していくことが可能である。なお、一般に変分量子回路の最適化では勾配消失問題 (barren plateau issue) と呼ばれる、量子ビット数に対してコスト関数の勾配が指数的に小さくなる問題が生じることが知られている<sup>24)</sup>。先行研究では、浅い量子回路を用いること、local cost function (局所的な測定結果によって構成されるコスト関数) を用いることでこの問題を回避しうることが示唆されている<sup>25)</sup>。ここでは、  $C_0(\alpha_0), C_1(\alpha_1)$  の構造として浅い量子回路を仮定しており、加えて式(20)で定義されるコスト関数  $f_{\text{cost}}(\alpha_0, \alpha_1)$  は local cost function とみなせるため、勾配消失問題を緩和できることが期待される。この点について数値的に検証した結果を 3.3.1 項で述べる。

$C_0(\alpha_0), C_1(\alpha_1)$  の最適化の問題点として、最適化後の  $cC_0(\hat{\alpha}_0), cC_1(\hat{\alpha}_1)$  は次式のように相対位相  $\varphi$  を与える。

$$\begin{aligned} cC_0(\hat{\alpha}_0)cC_1(\hat{\alpha}_1)|\psi(M_k\theta)\rangle \\ = \cos M\theta |0\rangle_n|0\rangle + e^{i\varphi} \sin M\theta |0\rangle_n|1\rangle \end{aligned} \quad (21)$$

したがって、式(19)の操作に近づけるために、  $\varphi$  を別途推定し、推定値  $\hat{\varphi}$  を用いて位相シフトの操作  $R_z(-\hat{\varphi})$  を加える必要がある。  $\varphi$  の推定は  $\theta, p$  の推定とは別途行う必要があるが、  $\varphi$  の推定誤差が  $\theta$  の推定に与える影響を解析すると、  $\varphi$  の推定にかかるコストは十分に小さく、無視することができる<sup>10)</sup>。

また、  $C_0(\hat{\alpha}_0), C_1(\hat{\alpha}_1)$  は次式のようにエラーを含みうる。

$$\begin{aligned}
 C_0(\hat{\alpha}_0)|\psi_0\rangle_n &= p_{c_0}|0\rangle_n + \sum_{j=1}^{2^n-1} p'_{c_0,j}|j\rangle_n \\
 C_1(\hat{\alpha}_1)|\psi_1\rangle_n &= p_{c_1}|0\rangle_n + \sum_{j=1}^{2^n-1} p'_{c_1,j}|j\rangle_n
 \end{aligned}
 \tag{22}$$

ここで、 $|p_{c_0}|^2 + \sum_{j=1}^{2^n-1} |p'_{c_0,j}|^2 = 1$ 、 $|p_{c_1}|^2 + \sum_{j=1}^{2^n-1} |p'_{c_1,j}|^2 = 1$ である。 $p_{c_0}, p_{c_1}$ は $C_0(\hat{\alpha}_0), C_1(\hat{\alpha}_1)$ が理想的な操作にどれだけ近いかを表している。 $p_{c_0}, p_{c_1}$ が $\theta$ の推定に与える影響は、(i)  $C_0(\alpha_0), C_1(\alpha_1)$ の両方の最適化が不完全なことによる効果と、(ii)  $C_0(\alpha_0), C_1(\alpha_1)$ の最適化に差があることによる効果に分けて議論できる。(i)の効果は、次式で定義されるパラメータ $p_c$ を用いて評価できる。

$$|p_c|^2 = |p_{c_0}|^2 \cos^2 M\theta + |p_{c_1}|^2 \sin^2 M\theta \tag{23}$$

$p_c \neq 1$ の場合、 $\theta$ の推定においては、 $1 - p_c$ の確率でノイズが発生した場合と同じ効果が生じる。ただし、 $p_c$ はGrover 演算子を作用させる回数 $m_k$ に依存しないため、 $m_k$ が大きい場合にはGrover 演算子の作用で発生するノイズの影響に比べて $p_c$ の効果はほとんど無視できる。(ii)の効果は、 $C_0(\alpha_0)$ と $C_1(\alpha_1)$ の最適化に偏りがある場合に生じるものである。この効果により、 $\theta$ の推定にはバイアスが生じる。このバイアスが無視できないほど大きい場合には、 $\theta, p, p_{c_0}, p_{c_1}$ を同時に推定する必要があるが、 $|p_{c_0}| - |p_{c_1}|$ が十分に小さい場合には、提案手法により、測定基底の最適化を行わない場合に比べて一定の精度改善が望める<sup>10)</sup>。

$C_0(\alpha_0), C_1(\alpha_1)$ の最適化における特筆すべき点として、 $\alpha_0, \alpha_1$ の最適化と $\theta, p$ の推定は図1左の量子回路によって同時に実行できる。前述の通り、 $\hat{\phi}$ の推定にかかるコスト( $A$ の実行回数)は無視できるため、 $B(\hat{\theta}_1, \hat{\alpha}_0, \hat{\alpha}_1, \hat{\phi})$ の構成に伴う追加のコストはほとんど無いといえる。

### 3.3 数値実験

#### 3.3.1 変分量子回路の最適化可能性の評価

$C_0(\alpha_0), C_1(\alpha_1)$ の変分最適化について、3.2.2項で述べた変分最適化の手法が勾配消失問題を緩和できているかを確認するため、式(20)で定義したコスト関数

$f_{\text{cost}}(\alpha_0, \alpha_1)$ の勾配の評価を行った。この評価では、 $\alpha_0, \alpha_1$ のうちの一つの変分パラメータに注目し、他のパラメータをランダムに設定して勾配を計算した。この計算を300回試行し、最終的な勾配の評価値を算出した。また、 $C_0(\alpha_0), C_1(\alpha_1)$ の構造としてHardware efficient ansatz<sup>26)</sup>を採用し、レイヤー数 $N_L$ を $N_L = \{4, 6, 8, 10, 12, 14\}$ とした。演算子 $A$ としては先行研究<sup>3)</sup>で提示されている図3の回路を $b_{\text{max}} = 1/4$ として用いた。

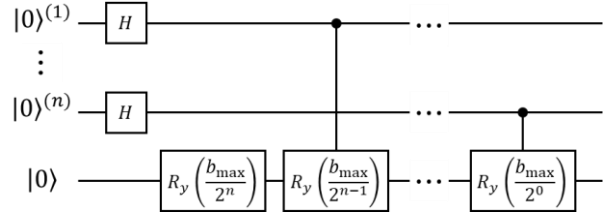


図3 演算子Aとして用いる量子回路<sup>3)</sup>。

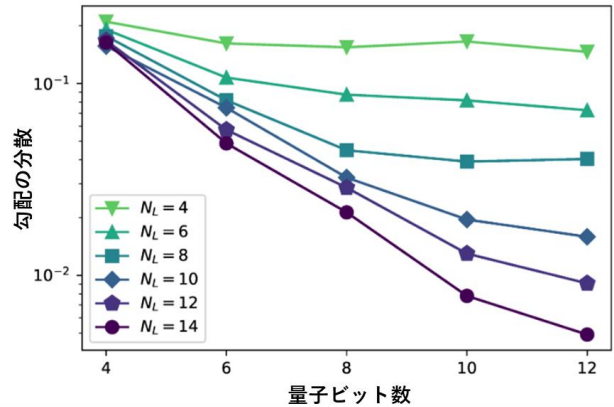


図4 コスト関数の勾配の評価結果。

図4の結果が示すように、コスト関数の勾配は量子ビット数の増大に対して指数的には減衰していない。これは、3.2.2項で述べたように、コスト関数がlocal cost functionであるためと考えられる。

#### 3.3.2 測定基底を最適化したMLAE

3.2節で述べたアルゴリズムを用いて振幅推定を行い、その性能を検証した。この検証でも図3の回路を演算子Aとして用いた。推定を200回試行し、Root mean squared error (RMSE)を評価した。なお、 $C_0(\alpha_0), C_1(\alpha_1)$ の最適化は事前に行い、最適に近い状態の $C_0(\hat{\alpha}_0), C_1(\hat{\alpha}_1)$ を使用した ( $|p_{c_0}|, |p_{c_1}| \geq 0.999$ )。

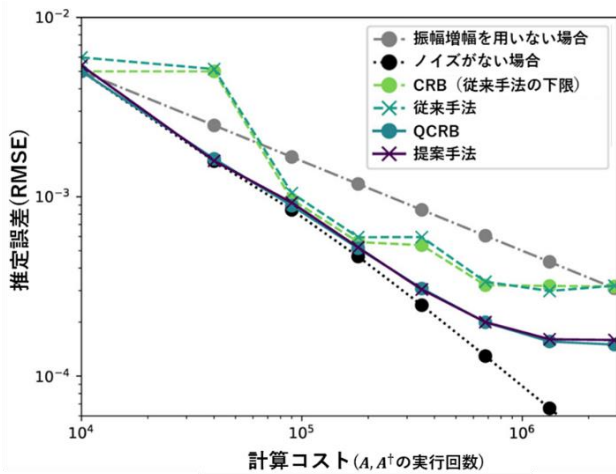


図 5 従来手法と提案手法で  $\theta$  を推定した際の計算コストと RMSE の関係。

図 5 は  $b_{\max} = 1/4$  における結果である。この結果から、提案手法 (紫のバツ印) は従来の手法 (緑のバツ印) よりも高い精度となっており、QCRB (青の丸印) に近い精度が達成できていることが分かる。

#### 4 まとめ

本稿では、適応的な推定手法を適用することで、ノイズの強度が未知の場合にも推定精度を理論的境界 (QCRB) に近い水準まで高めるアルゴリズムを提示した。また、数値実験によりこのアルゴリズムの有効性を示した。この成果は、現行および将来のノイズの多い量子デバイスの性能を最大限に引き出すための重要な一歩だと考えられる。〈みずほ〉においては、この高精度な振幅推定技術を、金融派生商品の価格評価や市場リスク計量モデルの高度化といった分野に応用し、より迅速かつ正確な意思決定支援の実現や、金融分析手法のさらなる高度化に繋げていくことを目指す。

本稿の手法では、MLAE において最適な測定基底を近似的に構成するために変分量子回路を用いた。変分量子回路の回路構造や最適化アルゴリズムには改良の余地があり、特に演算子  $A$  の構造に応じた回路設計や最適化手法の検討は今後の課題である。また、今回はノイズを Depolarizing ノイズとしてモデル化した。量子コンピュータ実機でより有効に機能するようにノイズのモデルを拡張することも重要なテーマである。

#### 引用文献

- 1) Montanaro, A.: Quantum speedup of Monte Carlo methods, Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 471.2181 (2015) 20150301.
- 2) Brassard, G. & Hoyer, P. & Mosca, M. & Tapp, A.: Quantum amplitude amplification and estimation, Contemporary Mathematics, 305 (2002) 53-74.
- 3) Suzuki, Y. & Uno, S. & Raymond, R. & Tanaka, T. & Onodera, T. & Yamamoto, N.: Amplitude estimation without phase estimation, Quantum Information Processing, 19 (2020) 1-17.
- 4) Nakaji, K.: Faster amplitude estimation, Quantum Information and Computation, 20.13&14 (2020) 1109-1123.
- 5) Grinko, D. & Gacon, J. & Zoufal, C. & Woerner, S.: Iterative quantum amplitude estimation, npj Quantum Information, 7.1 (2021) 52.
- 6) Tanaka, T. & Suzuki, Y. & Uno, S. & Raymond, R. & Onodera, T. & Yamamoto, N.: Amplitude estimation via maximum likelihood on noisy quantum computer, Quantum Information Processing, 20 (2021) 1-29.
- 7) Tanaka, T. & Uno, S. & Onodera, T. & Yamamoto, N. & Suzuki, Y.: Noisy quantum amplitude estimation without noise estimation, Physical Review A, 105.1 (2022) 012411.
- 8) Giurgica-Tiron, T. & Kerenidis, I. & Labib, F. & Prakash, A. & Zeng, W.: Low depth algorithms for quantum amplitude estimation, Quantum, 6 (2022) 745.
- 9) Herbert, S. & Williams, I. & Guichard, R. & Ng, D.: Noise-aware quantum amplitude estimation, IEEE Transactions on Quantum Engineering, 01 (2024) 1-26.
- 10) Oshio, K. & Suzuki, Y. & Wada, K. & Hisanaga, K. & Uno, S. & Yamamoto, N.: Adaptive measurement strategy for noisy quantum amplitude estimation with variational quantum circuits, Physical Review A, 110.6 (2024) 062423.
- 11) Nielsen, M. A. & Chuang, I. L.: Quantum computation and quantum information, Cambridge university press (2010).
- 12) 嶋田義皓.: 量子コンピューティング—基本アルゴリズムから量子機械学習まで—, 株式会社 オーム社 (2020).

- 13) Rao, C. R.: Linear statistical inference and its applications, New York: Wiley, Vol. 2 (1973) 263-270.
- 14) Helstrom, C.: The minimum variance of estimates in quantum signal detection, IEEE Transactions on information theory, 14.2 (1968) 234-242.
- 15) Braunstein, S. L. & Caves, C. M.: Statistical distance and the geometry of quantum states, Physical Review Letters, 72.22 (1994) 3439.
- 16) Paris, M. G.: Quantum estimation for quantum technology, International Journal of Quantum Information, 7.sup01 (2009) 125-137.
- 17) Suzuki, J. & Yang, Y. & Hayashi, M.: Quantum state estimation with nuisance parameters, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 53.45 (2020) 453001.
- 18) Uno, S. & Suzuki, Y. & Hisanaga, K. & Raymond, R. & Tanaka, T. & Onodera, T. & Yamamoto, N.: Modified Grover operator for quantum amplitude estimation, New Journal of Physics, 23.8 (2021) 083031.
- 19) Wada, K. & Fukuchi, K. & Yamamoto, N.: Quantum-enhanced mean value estimation via adaptive measurement, Quantum, 8 (2024) 1463.
- 20) 林正人, & 松本啓史.: 測定自由度をもつ統計モデルと量子力学, 数理解析研究所講究録, 1055 (1998) 96-110.
- 21) Barndorff-Nielsen, O. E. & Gill, R. D.: Fisher information in quantum statistics, Journal of Physics A: Mathematical and General, 33.24 (2000) 4481.
- 22) Mitarai, K. & Negoro, M. & Kitagawa, M. & Fujii, K.: Quantum circuit learning, Physical Review A, 98.3 (2018) 032309.
- 23) Schuld, M. & Bergholm, V. & Gogolin, C. & Izaac, J. & Killoran, N.: Evaluating analytic gradients on quantum hardware, Physical Review A, 99.3 (2019) 032331.
- 24) McClean, J. R. & Boixo, S. & Smelyanskiy, V. N. & Babbush, R. & Neven, H.: Barren plateaus in quantum neural network training landscapes, Nature communications, 9.1 (2018) 4812.
- 25) Cerezo, M. & Sone, A. & Volkoff, T. & Cincio, L. & Coles, P. J.: Cost function dependent barren plateaus in shallow parametrized quantum circuits, Nature communications, 12.1 (2021) 1791.
- 26) Kandala, A. & Mezzacapo, A. & Temme, K. & Takita, M. & Brink, M. & Chow, J. M. & Gambetta, J. M.: Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets, nature, 549.7671 (2017) 242-246.