

確率的虚時間発展法(PITE法)による反応移流 拡散方程式の量子アルゴリズム



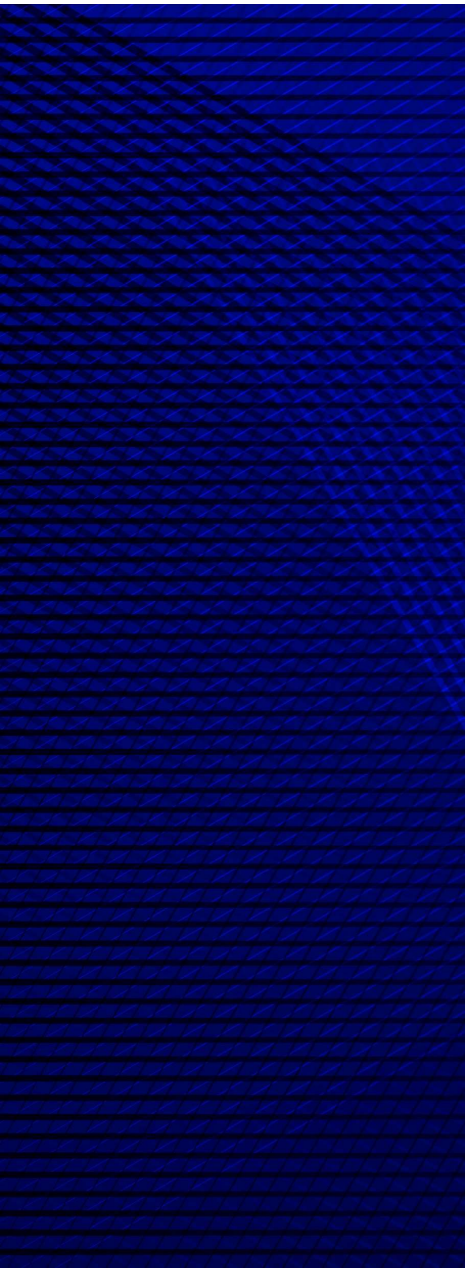
—— 回路実装および量子線型方程式アルゴリズム(QLSAs)との比較

株式会社Quemix & 東京大学

黄欣馳, 西紘史, 小杉太一, 川田佳史, 松下雄一郎

第2回 Quantum CAE 研究会 @産業技術総合研究所 2025年5月8-9日





問題背景

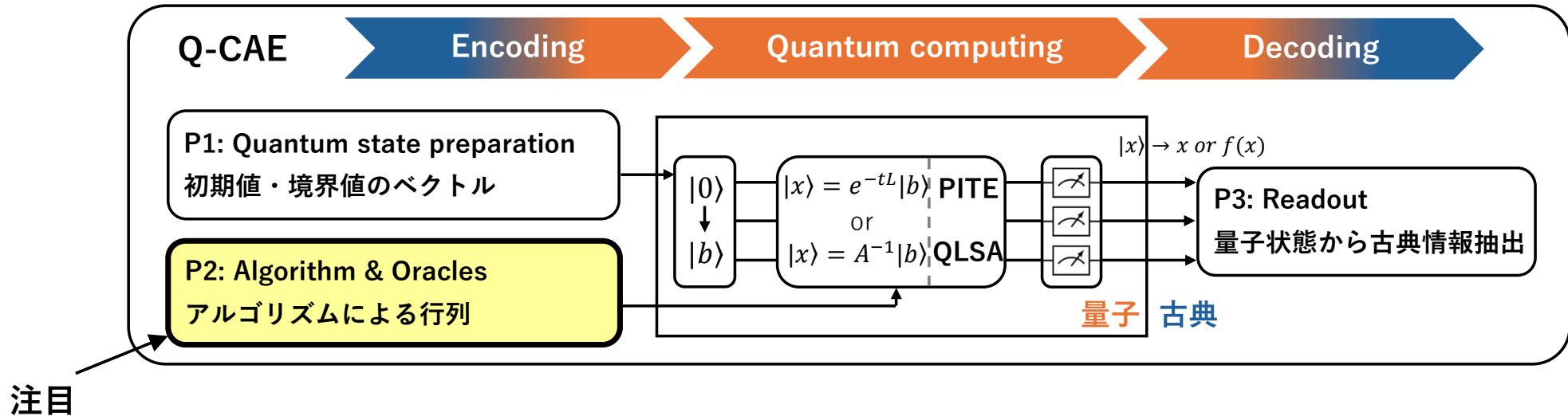
問題背景

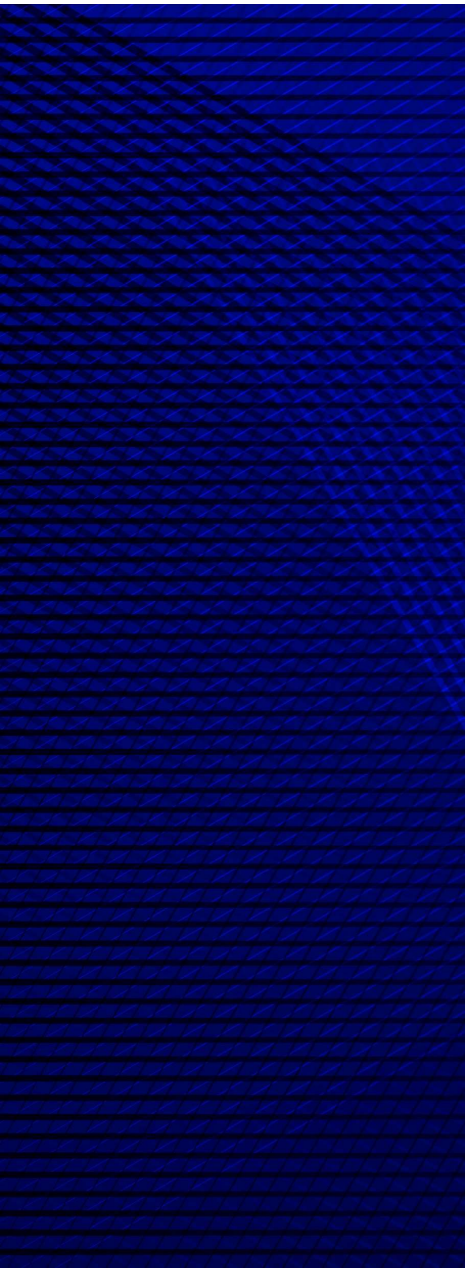
- 計算工学において、偏微分方程式(PDEs)の数値解は重要な課題
- Conventional 手法 = 線型方程式に帰着: $Ax = b$, A, b が既知
- 大規模問題に対して、古典計算量が膨大、もしくはメモリが不足
- 量子計算機による高速化が期待されている

$$\partial_t f = \hat{L}f \text{ or } \hat{L}f = g$$

量子CAE計算

量子計算機を用いて行列演算を加速するもの





問題設定と主要結果

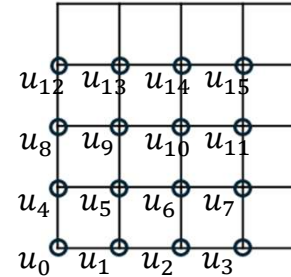
時間発展方程式

$$\partial_t u(t) + \hat{H}u(t) = 0$$

- 空間離散化

$$u \xrightarrow{\text{space discretization}} \mathbf{u}_N$$

$$\partial_t \mathbf{u}_N(t) + H_N \mathbf{u}_N(t) = \mathbf{0}.$$



解のグリッド点における値
 $\mathbf{u}_N = (u_0, u_1, \dots, u_{N-1})$

問題設定

- 初期値 u_0 , ターゲット時間 T , グリッド数 N , 誤差上界 ε が与えられているとする.
- 量子計算機において、初期値に対応する入力量子状態 $|\mathbf{u}_N(0)\rangle = \mathbf{u}_N(0)/\|\mathbf{u}_N(0)\|$ が与えられたとき、以下の式:

$$\| |\tilde{\mathbf{u}}_N(T)\rangle - |\mathbf{u}_N(T)\rangle \| \leq \varepsilon,$$

を満たす近似解の量子状態 $|\tilde{\mathbf{u}}_N(T)\rangle$ を用意する. ただし、 $|\mathbf{u}_N(T)\rangle = \mathbf{u}_N(T)/\|\mathbf{u}_N(T)\|$ である.

主要結果

- 以下のゲート操作数・回路深さで、近似解の量子状態を用意できる:

$$O(\text{polylog}N (1/\varepsilon)^{1+o(1)}).$$

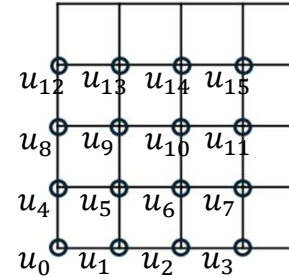
時間発展方程式

$$\partial_t u(t) + \hat{H}u(t) = 0$$

- 空間離散化

$$u \xrightarrow{\text{space discretization}} \mathbf{u}_N$$

$$\partial_t \mathbf{u}_N(t) + H_N \mathbf{u}_N(t) = \mathbf{0}.$$



解のグリッド点における値
 $\mathbf{u}_N = (u_0, u_1, \dots, u_{N-1})$

問題設定

- 初期値 u_0 , ターゲット時間 T , グリッド数 N , 誤差上界 ε が与えられているとする.
- 量子計算機において、初期値に対応する入力量子状態 $|\mathbf{u}_N(0)\rangle = \mathbf{u}_N(0)/\|\mathbf{u}_N(0)\|$ が与えられたとき、以下の式:

$$\| |\tilde{\mathbf{u}}_N(T)\rangle - |\mathbf{u}_N(T)\rangle \| \leq \varepsilon,$$

を満たす近似解の量子状態 $|\tilde{\mathbf{u}}_N(T)\rangle$ を用意する. ただし、 $|\mathbf{u}_N(T)\rangle = \mathbf{u}_N(T)/\|\mathbf{u}_N(T)\|$ である.

主要結果

- 以下のゲート操作数・回路深さで、近似解の量子状態を用意できる:

$$O(\text{polylog}N (1/\varepsilon)^{1+o(1)}).$$

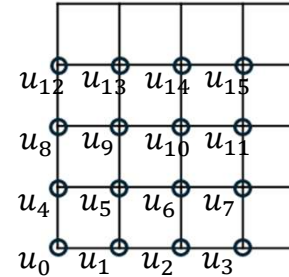
時間発展方程式

$$\partial_t u(t) + \hat{H}u(t) = 0$$

- 空間離散化

$$u \xrightarrow{\text{space discretization}} \mathbf{u}_N$$

$$\partial_t \mathbf{u}_N(t) + H_N \mathbf{u}_N(t) = \mathbf{0}.$$



解のグリッド点における値
 $\mathbf{u}_N = (u_0, u_1, \dots, u_{N-1})$

問題設定

- 初期値 u_0 , ターゲット時間 T , グリッド数 N , 誤差上界 ε が与えられているとする.
- 量子計算機において、初期値に対応する入力量子状態 $|\mathbf{u}_N(0)\rangle = \mathbf{u}_N(0)/\|\mathbf{u}_N(0)\|$ が与えられたとき、以下の式:

$$\| |\tilde{\mathbf{u}}_N(T)\rangle - |\mathbf{u}_N(T)\rangle \| \leq \varepsilon,$$

を満たす近似解の量子状態 $|\tilde{\mathbf{u}}_N(T)\rangle$ を用意する. ただし、 $|\mathbf{u}_N(T)\rangle = \mathbf{u}_N(T)/\|\mathbf{u}_N(T)\|$ である.

主要結果

- 以下のゲート操作数・回路深さで、近似解の量子状態を用意できる:

$$O(\text{polylog}N (1/\varepsilon)^{1+o(1)}).$$

確率的虚時間発展 (Probabilistic Imaginary-Time Evolution, PITE)

- (古典) Exponential Integrator (EI) $\mathbf{u}_N(0) \rightarrow \mathbf{u}_N(T) = \exp(-TH_N) \mathbf{u}_N(0).$

※ 線型方程式を解く方法と違う

- (量子) PITE 演算子

$$|\mathbf{u}_N(0)\rangle \rightarrow |\mathbf{u}_N(T)\rangle = \frac{\exp(-TH_N) \mathbf{u}_N(0)}{\|\exp(-TH_N) \mathbf{u}_N(0)\|}.$$

- さらに、以下の近似 PITE 演算子 (Alternative Approximate PITE, AAPITE) を導入する:

$$|\mathbf{u}_N(0)\rangle \rightarrow |\tilde{\mathbf{u}}_N(T)\rangle = \frac{\cos^K(\sqrt{2\Delta\tau H_N}) \mathbf{u}_N(0)}{\|\cos^K(\sqrt{2\Delta\tau H_N}) \mathbf{u}_N(0)\|}.$$

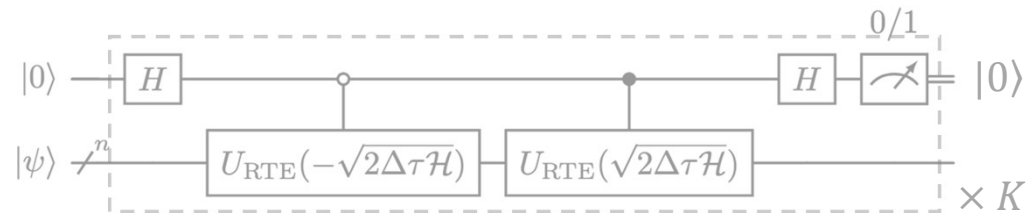
量子計算機で実現
可能な演算子にする.

量子計算機で効率
良く構成可能な近似
演算子にする.
 $T = K\Delta\tau$

AAPITE の量子回路

- 一つだけの補助ビットを使用.

- 所要オラクル: $\exp(\pm i\sqrt{2\Delta\tau H_N})$



※ 高次近似 PITE も構成できる: $\cos(\sqrt{2\Delta\tau H} - \sqrt{2\Delta\tau^3 H^3}/6) = \exp(-\Delta\tau H) + O(\Delta\tau^3)$

確率的虚時間発展 (Probabilistic Imaginary-Time Evolution, PITE)

- (古典) Exponential Integrator (EI) $\mathbf{u}_N(0) \rightarrow \mathbf{u}_N(T) = \exp(-TH_N) \mathbf{u}_N(0)$.

※ 線型方程式を解く方法と違う

- (量子) PITE 演算子

$$|\mathbf{u}_N(0)\rangle \rightarrow |\mathbf{u}_N(T)\rangle = \frac{\exp(-TH_N) \mathbf{u}_N(0)}{\|\exp(-TH_N) \mathbf{u}_N(0)\|}.$$

- さらに、以下の近似 PITE 演算子 (Alternative Approximate PITE, AAPITE) を導入する:

$$|\mathbf{u}_N(0)\rangle \rightarrow |\tilde{\mathbf{u}}_N(T)\rangle = \frac{\cos^K(\sqrt{2\Delta\tau H_N}) \mathbf{u}_N(0)}{\|\cos^K(\sqrt{2\Delta\tau H_N}) \mathbf{u}_N(0)\|}.$$

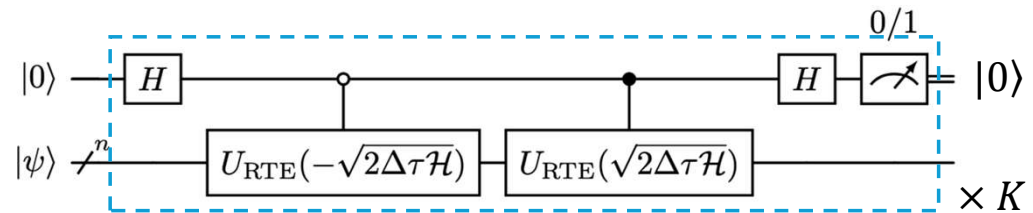
量子計算機で実現
可能な演算子にする。

量子計算機で効率
良く構成可能な近似
演算子にする。
 $T = K\Delta\tau$

AAPITE の量子回路

- 一つだけの補助ビットを使用.

- 所要オラクル: $\exp(\pm i\sqrt{2\Delta\tau H_N})$



- ※ 高次近似 PITE も構成できる: $\cos(\sqrt{2\Delta\tau H} - \sqrt{2\Delta\tau^3 H^3}/6) = \exp(-\Delta\tau H) + O(\Delta\tau^3)$

フーリエスペクトル法(FSM)による効率良い実装法

- 簡単のため、線型の反応移流拡散方程式を考える：

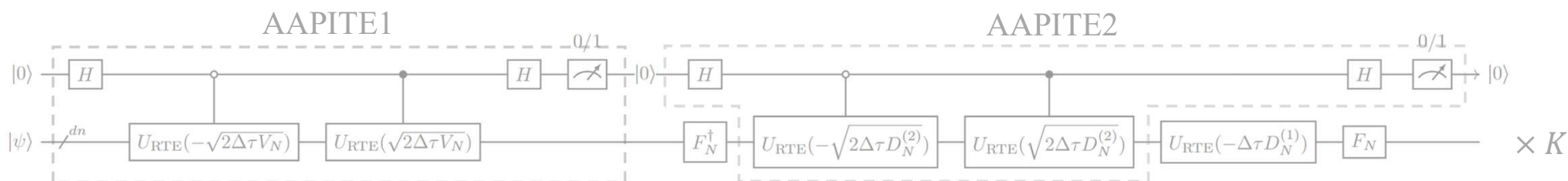
$$\hat{H} = [-a\nabla^2] + [\mathbf{v} \cdot \nabla] + [V]$$

- FSM + 一次鈴木=トロッター分解を用いると

$$\exp(-TH_N) \approx \left(F_N \exp(i\Delta\tau D_N^{(1)}) \exp(-\Delta\tau D_N^{(2)}) F_N^\dagger \exp(-\Delta\tau V_N) \right)^K.$$

F_N : (中心)量子フーリエ変換、 $D_N^{(1)}, D_N^{(2)}, V_N$: (対角成分は既知関数に従う)対角行列.

- AAPITE を二回使う量子回路：



- 所要オラクル=対角ユニタリ演算子の実装：

[Huang et al. QIP '25] $\Rightarrow$ 一時間ステップの回路深さは $O(\text{polylog}N (1/\epsilon)^{o(1)})$.

付録1

※ 誤差評価により $K = O(1/\epsilon)$.

付録2

フーリエスペクトル法(FSM)による効率良い実装法

- 簡単のため、線型の反応移流拡散方程式を考える:

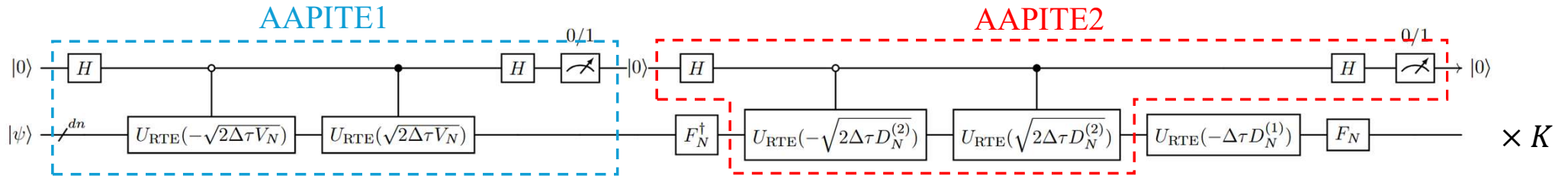
$$\hat{H} = [-a\nabla^2] + [\mathbf{v} \cdot \nabla] + [V]$$

- FSM + 一次鈴木=トロッター分解を用いると

$$\exp(-TH_N) \approx \left(F_N \exp(i\Delta\tau D_N^{(1)}) \exp(-\Delta\tau D_N^{(2)}) F_N^\dagger \exp(-\Delta\tau V_N) \right)^K.$$

F_N : (中心)量子フーリエ変換、 $D_N^{(1)}, D_N^{(2)}, V_N$: (対角成分は既知関数に従う)対角行列.

- AAPITE を二回使う量子回路:



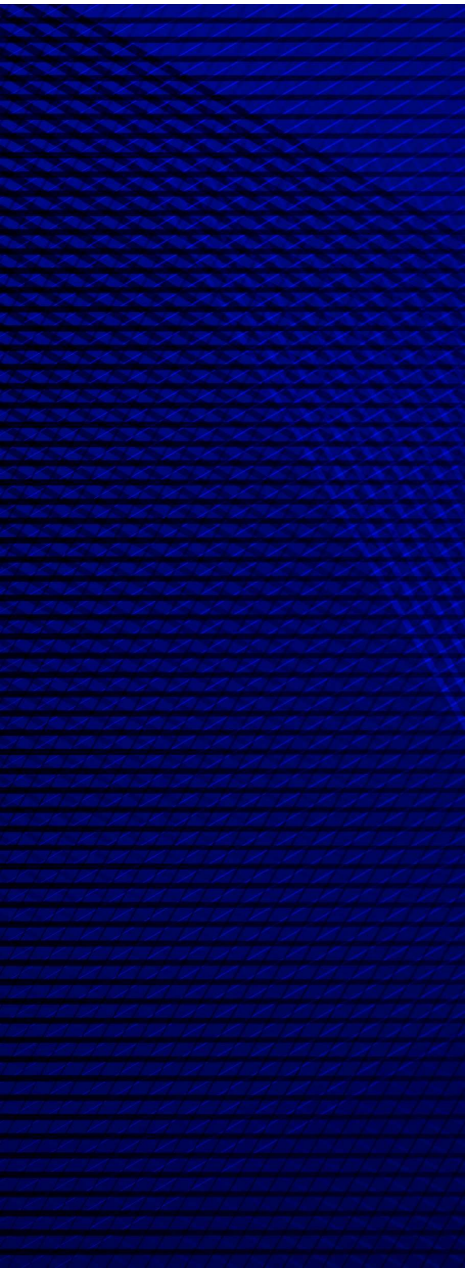
- 所要オラクル=対角ユニタリ演算子の実装:

[Huang et al. QIP '25] $\Rightarrow$ 一時間ステップの回路深さは $O(\text{polylog}N (1/\epsilon)^{o(1)})$.

論文Appendix C

※ 誤差評価により $K = O(1/\epsilon)$.

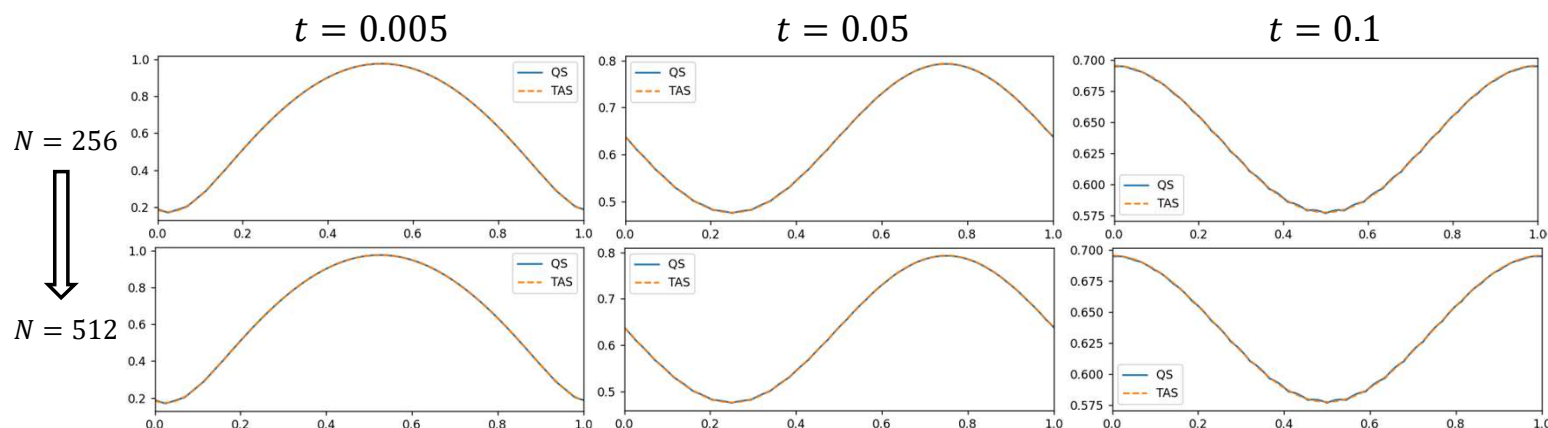
論文Appendix E



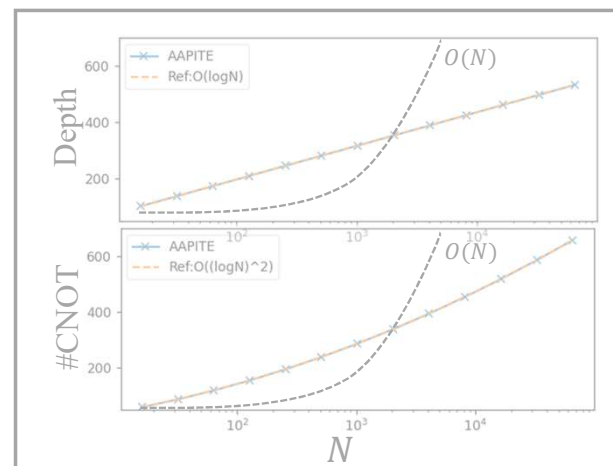
数值例

1D 移流拡散方程式

$\Delta\tau = 0.0005, K = 200$

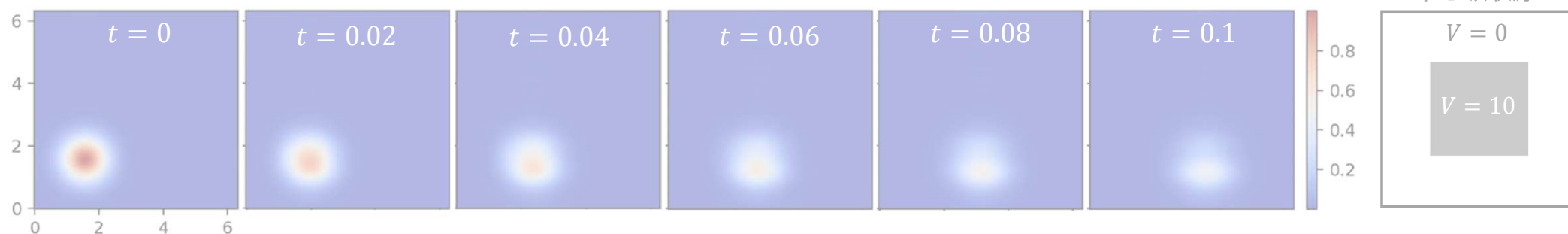


※ オイラー差分法と異なり、時間ステップ $\Delta\tau$ と空間ステップの二乗 $(L/N)^2$ の間の比例係数が定数でなくても、数値的に安定。



2D 反応移流拡散方程式

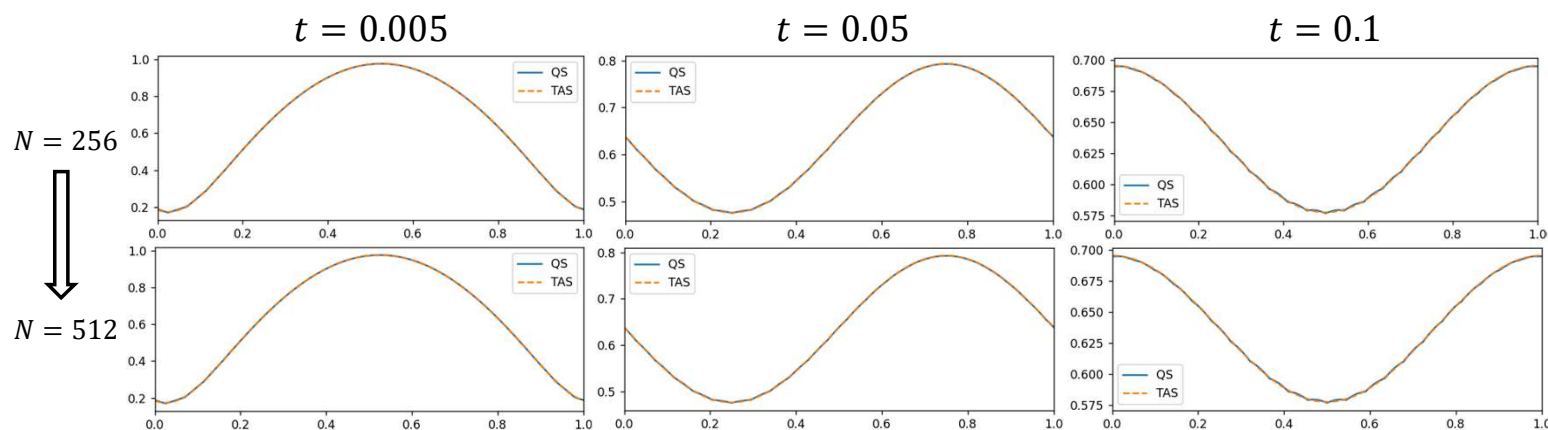
$N = 16 \times 16, N_f = 128 \times 128, \Delta\tau = 0.0025, K = 40$



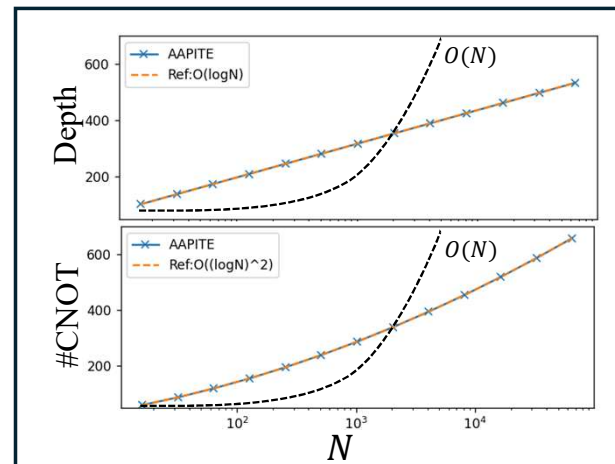
※ FSM により、 128×128 グリッド点における解は 16×16 等少数の計算グリッド点(波数空間のグリッド数)によって算出できる。

1D 移流拡散方程式

$\Delta\tau = 0.0005, K = 200$

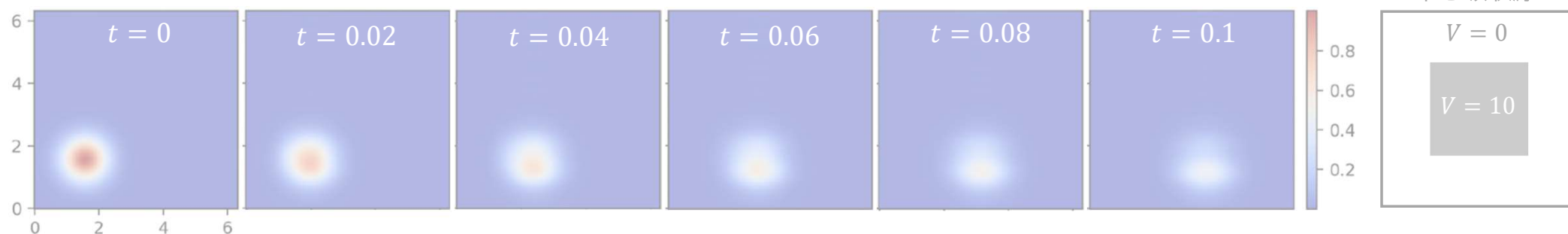


※ オイラー差分法と異なり、時間ステップ $\Delta\tau$ と空間ステップの二乗 $(L/N)^2$ の間の比例係数が定数でなくても、数値的に安定。



2D 反応移流拡散方程式

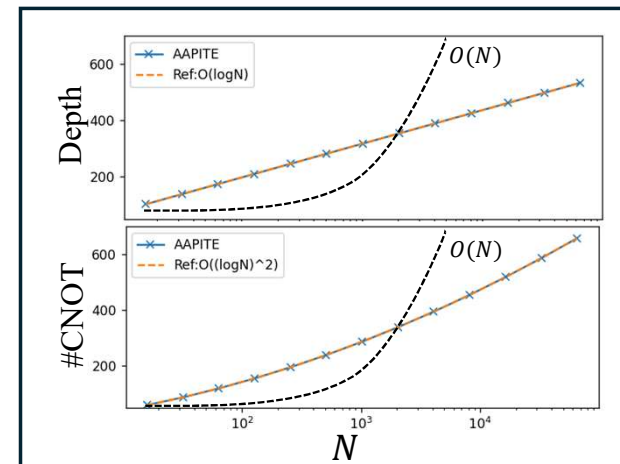
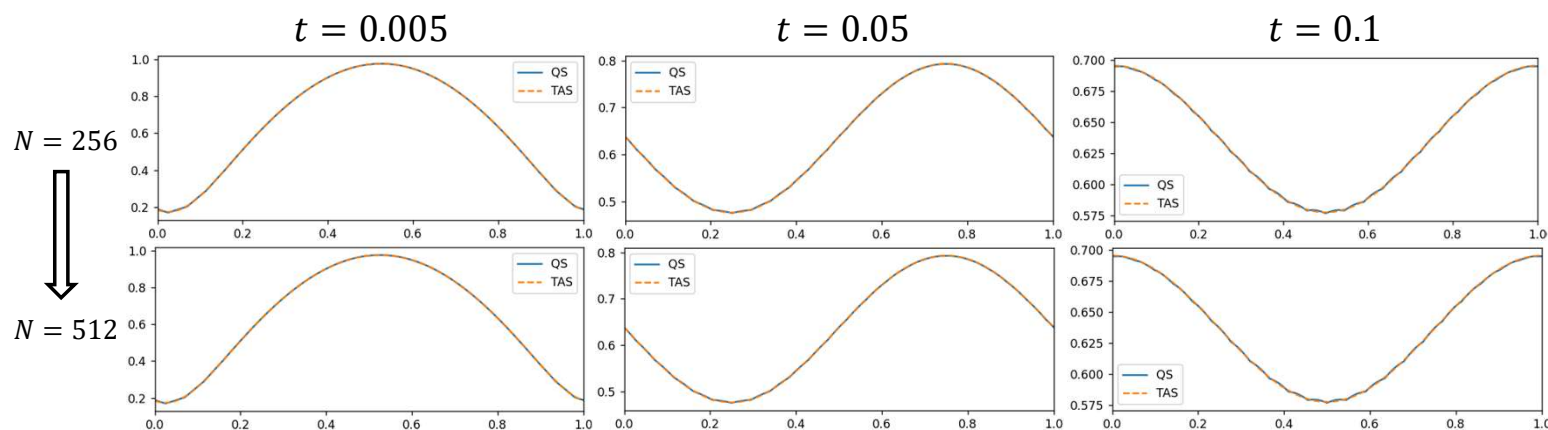
$N = 16 \times 16, N_f = 128 \times 128, \Delta\tau = 0.0025, K = 40$



※ FSM により、 128×128 グリッド点における解は 16×16 等少数の計算グリッド点(波数空間のグリッド数)によって算出できる。

1D 移流拡散方程式

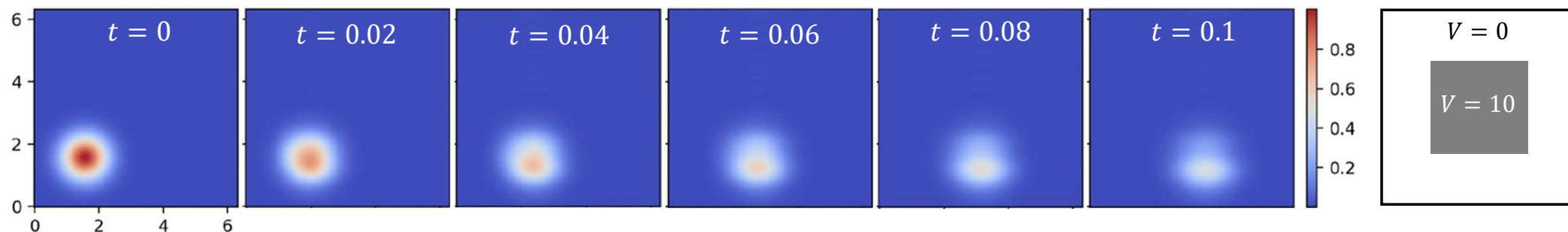
$\Delta\tau = 0.0005, K = 200$



※ オイラー差分法と異なり、時間ステップ $\Delta\tau$ と空間ステップの二乗 $(L/N)^2$ の間の比例係数が定数でなくても、数値的に安定。

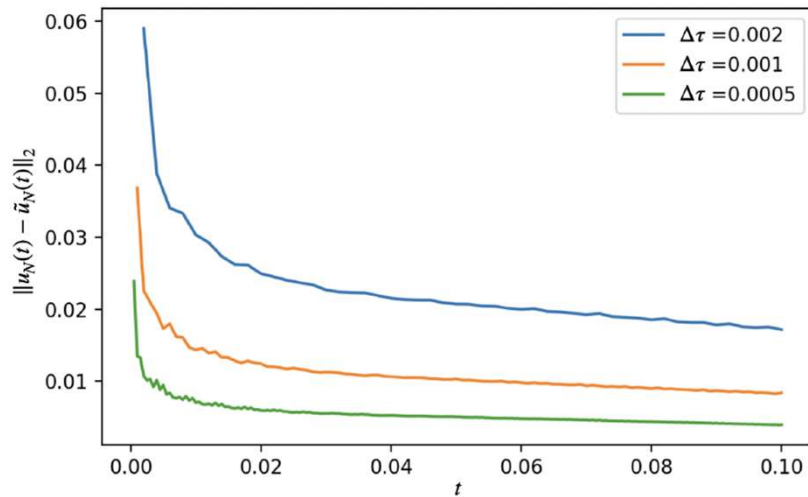
2D 反応移流拡散方程式

$N = 16 \times 16, N_f = 128 \times 128, \Delta\tau = 0.0025, K = 40$



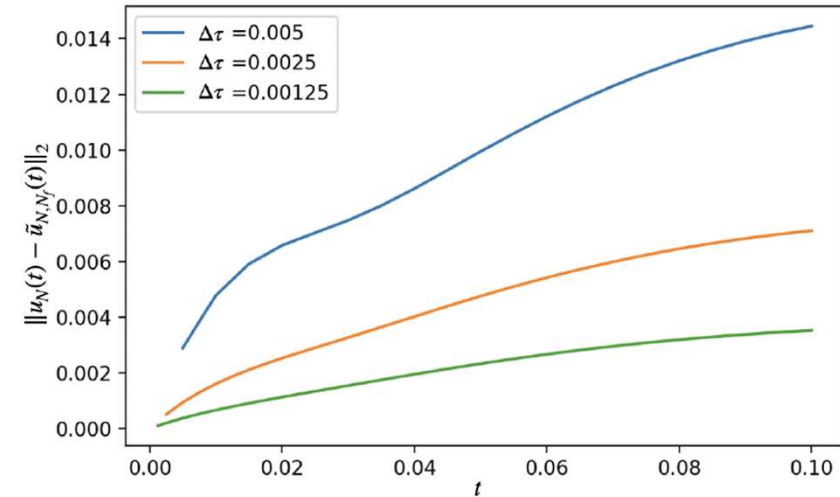
※ FSM により、 128×128 グリッド点における解は 16×16 等少数の計算グリッド点(波数空間のグリッド数)によって算出できる。

1D 移流拡散方程式



成功確率 ≈ 0.81 .

2D 反応移流拡散方程式

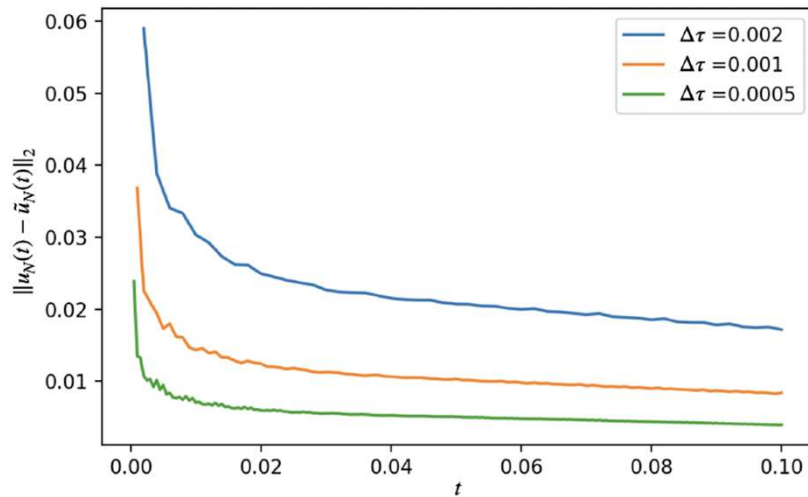


成功確率 ≈ 0.26 .

$$\mathbb{P}_{\text{tot}} = \left\| \left(F_N e^{i\Delta\tau D_N^{(1)}} \cos \left(\sqrt{2\Delta\tau D_N^{(2)}} \right) F_N^\dagger \cos \left(\sqrt{2\Delta\tau V_N} \right) \right)^K |u_N(0)\rangle \right\|^2 \approx \frac{\|u_N(T)\|^2}{\|u_N(0)\|^2} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{\|u(T)\|_{L^2}^2}{\|u_0\|_{L^2}^2}.$$

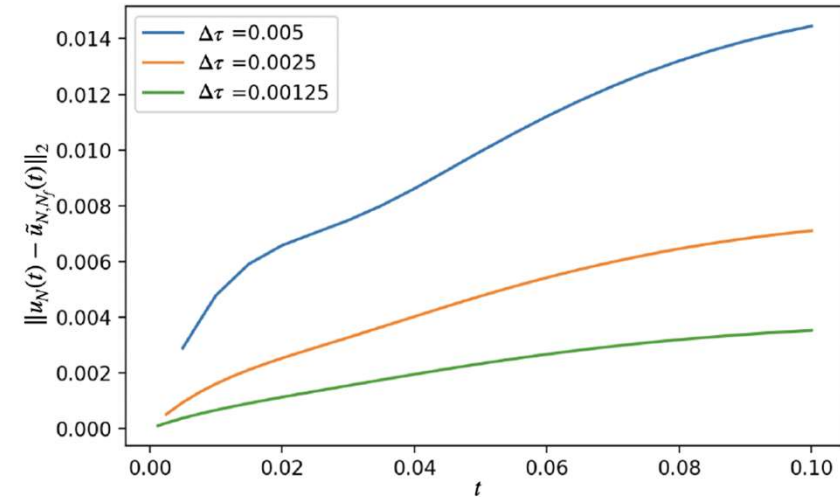
※ 成功確率には、解のノルム情報がある。また、(T に依存した)定数に収束する。

1D 移流拡散方程式



成功確率 ≈ 0.81 .

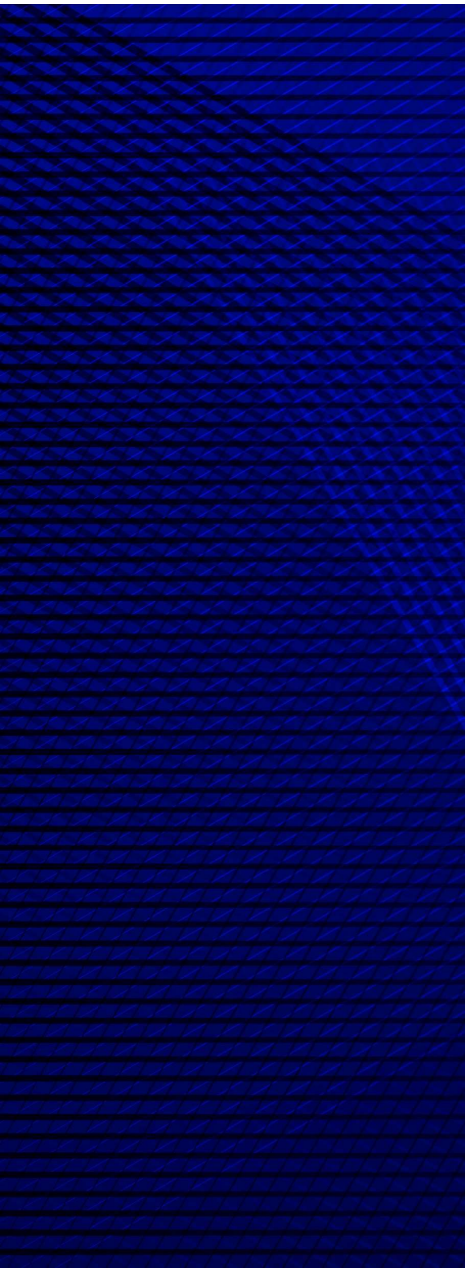
2D 反応移流拡散方程式



成功確率 ≈ 0.26 .

$$\mathbb{P}_{\text{tot}} = \left\| \left(F_N e^{i\Delta\tau D_N^{(1)}} \cos \left(\sqrt{2\Delta\tau D_N^{(2)}} \right) F_N^\dagger \cos \left(\sqrt{2\Delta\tau V_N} \right) \right)^K |u_N(0)\rangle \right\|^2 \approx \frac{\|u_N(T)\|^2}{\|u_N(0)\|^2} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{\|u(T)\|_{L^2}^2}{\|u_0\|_{L^2}^2}.$$

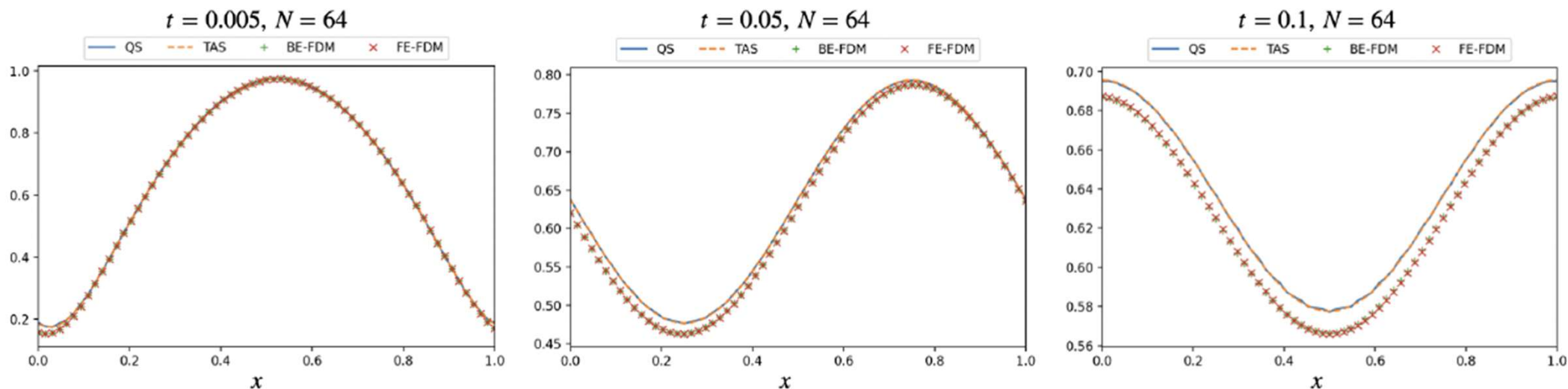
※ 成功確率には、解のノルム情報がある。また、 $(T$ に依存した)定数に収束する。



考察および比較

1D 移流拡散方程式の例

$\Delta\tau = 0.0005, K = 10, 100, 200$



解が局在関数となる場合を除けば、FSMはFDMより精度が良い。(空間離散化誤差の減衰が速い as $N \rightarrow \infty$)



FSMに定式化できる問題はFSMを採用することを推奨。(例えば、周期境界条件)

時間離散化 EI vs. BE vs. AAPITEs vs. APITEs

Exponential Integrator(EI)

Backward Euler(BE)

AAPITE

APITE($m_0 = 0.9$)

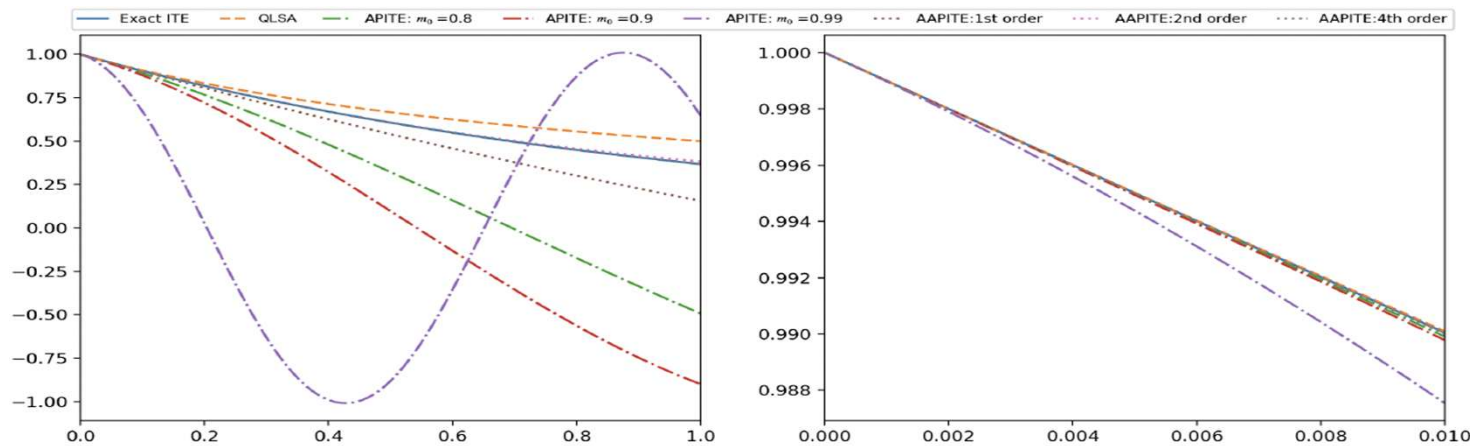
$$h_0(y) := e^{-y} = 1 - y + y^2/2 + O(y^3),$$

$$h_1(y) := (1 + y)^{-1} = 1 - y + y^2 + O(y^3),$$

$$h_2(y) := \cos(\sqrt{2}y) = 1 - y + y^2/6 + O(y^3),$$

$$h_3(y) := \cos\left(\arccos(0.9) + \frac{0.9y}{\sqrt{1-0.9^2}}\right)/0.9 = 1 - y - 81y^2/38 + O(y^3).$$

$$y \sim \Delta\tau H_N$$



AAPITEとBEが同様に一次近似である。ただし、二次係数はAAPITEの方がやや優れる。

※ BE-QLSAs: 時間発展方程式を解くQLSAsのうち時間ステップごとに逆演算子を計算するもの。

量子線型方程式アルゴリズム(QLSAs)

$$|x\rangle = A^{-1}|b\rangle$$

- 先駆的手法: QPE-based QLSAs = HHL(Harrow-Hassidim-Lloyd) algorithm [Harrow et al. PRL '09]
- 改善手法: QSVT-based QLSAs など [Gilyen et al. STOC 2019 '19]
- 時間発展に対応する手法: Time-sequential QLSAs (BE-QLSAs) e.g. [Ingelmann et al. '24]
One-shot QSVT-based QLSAs e.g. [Krovi Quantum '23]

線型方程式アルゴリズムの比較(古典 vs. 量子)

N : 行列サイズ=グリッド数, d : 空間次元数, κ : 条件数, ε : 誤差上界

		線型方程式	二階 PDEs
古典	Sparse CG e.g. [Saad SIAM '03]	$O\left(\sqrt{\kappa} N \log(1/\varepsilon)\right)$	$O\left(N^{(d+1)/d} \log(1/\varepsilon)\right)$
量子	QLSAs e.g. [Krovi Quantum '23]	$O\left(\kappa \operatorname{polylog} N \operatorname{polylog}(1/\varepsilon)\right)$	$\tilde{O}\left(N^{2/d} \operatorname{polylog}(1/\varepsilon)\right)$

※ 行列サイズ N への依存性に注目するため、空間次元数 d へのマイナー依存性を省略した。
二階のPDEでは、条件数は行列サイズの多項式オーダー $\kappa = O(N^{2/d})$.

ゲート操作数・回路深さ BE-QLSAs vs. AAPITE

- BE-QLSAsとAAPITEは、同程度の時間ステップ $\Delta\tau$ をとれば良い.
- そのため、一時間ステップごとのゲート操作数・回路深さを比較すれば良い.

	BE-QLSAs	AAPITE
一時間ステップごとのゲート操作数・回路深さ	$\tilde{O}\left(N^{2/d} \text{polylog}(1/\varepsilon)\right)$	$O(\text{polylog } N (1/\varepsilon)^{o(1)})$

- QSVT-based QLSAsは最良オーダーのQLSAsで、高次多項式によって逆演算子を近似する.

※ QSVT(Quantum Singular Value Transformation)を使うとき、高次多項式の係数を計算する必要がある. 理論上、次数 $p = O(\kappa \log(1/\varepsilon))$ を取るべきである. 一方、係数を計算する際にニュートン法を適用した場合の古典計算コストは $O(p^2)$ であるから、現状のアルゴリズムでは大きな条件数(1000+)を扱い難い.

QLSAs との比較(反応移流拡散方程式を例として)

	Variations	Basic oracles	Query complexity ^[a] /Iterations	Oracle complexity /Complexity per iter.	Total complexity	Comments
Sparse CG [Saad SIAM '03] (古典)	*BE	N/A	$O(N^{1/d}(1/\varepsilon)\log(1/\varepsilon))$	$O(N)$	$\tilde{O}(N^{1+1/d}(1/\varepsilon))^*$	Sparse CG is a conventional iterative method for solving linear systems. Due to the N -dependence in condition number, preconditioning is needed for large matrices.
	EM	N/A	$\tilde{O}(N^{1/d}\text{polylog}(1/\varepsilon))$	$\tilde{O}(N^{1+2/d}\log(1/\varepsilon))$	$\tilde{O}(N^{1+3/d}\text{polylog}(1/\varepsilon))$	
QLSAs [Harrow et al. PRL '09, Krovi Quantum '23] (量子)	QPE(=HHL) + BE	RTEs for matrix $A = I + \Delta\tau H_N$ $\Delta\tau = O(\varepsilon)$	$\tilde{O}(N^{2/d}(1/\varepsilon))$	$\tilde{O}(N^{2/d}(1/\varepsilon))$	$\tilde{O}(N^{4/d}(1/\varepsilon)^2)$	QSVT-based QLSA is one of the best-order quantum algorithms for linear systems. The oracle complexity is not yet clarified if there exists a self-reaction potential. Because of the large condition number, <u>QLSAs are not applicable for large matrices, and hence preconditioning is indispensable.</u> ※ The current QLSAs have $O(N^{2/d})$ parameters, whose classical calculations need complexity $\Omega(N^{2/d})$.
	QSVT + BE	Block encoding for normalized matrix A	$O(N^{2/d}(1/\varepsilon)\log(1/\varepsilon))$	$\Omega(\text{polylog}N)$	$\tilde{O}(N^{2/d}(1/\varepsilon))$	
	QSVT + EM	Block encoding for a normalized enlarged matrix	$\tilde{O}(N^{2/d}\text{polylog}(1/\varepsilon))$	$\Omega(\text{polylog}N)$	$\tilde{O}(N^{2/d}\text{polylog}(1/\varepsilon))^$	
PITE algorithms (proposal) (量子)	APITE + ST1 [Kosugi et al. PRR '22]	RTE for matrix H_N	$O((1/\varepsilon)\exp(1/\varepsilon))$	$O(\text{polylog}N(1/\varepsilon)^{o(1)})$	$\tilde{O}(\text{polylog}N\exp(1/\varepsilon))$	<u>AAPITE algorithm is applicable for large matrices, and can be extended to coupling systems.</u> The oracle complexity relies on the FSM with periodic BCs. Thus, it is not directly applicable for the cases with complicated boundaries.
	AAPITE + ST1	RTEs for matrices $D_N^{(1)}, \sqrt{D_N^{(2)}}, \sqrt{V_N}$	$O((1/\varepsilon))$	$O(\text{polylog}N(1/\varepsilon)^{o(1)})$	$\tilde{O}(\text{polylog}N(1/\varepsilon)^{1+o(1)})^$	

BE: backward Euler, EM: enlarged matrix, see the matrix L in Krovi 2023, ST1: first-order Suzuki-Trotter formula, BC: boundary condition.

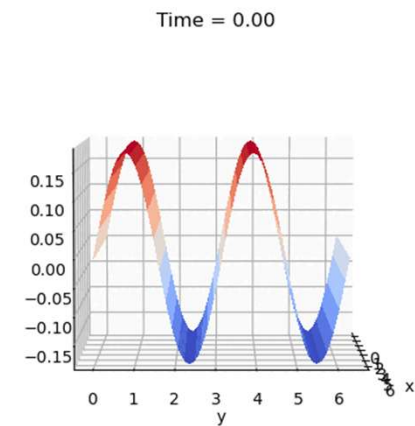
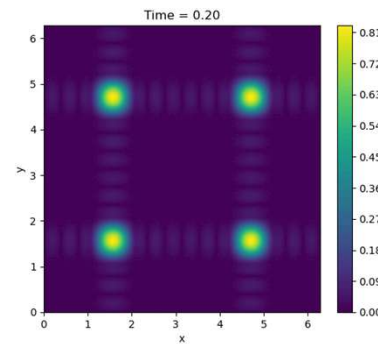
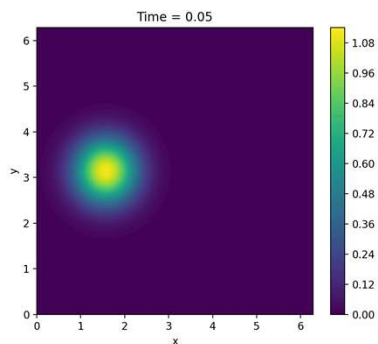
* denotes the best-order algorithm in each block of algorithms.

[a] The $(1/\varepsilon)$ dependence in the query complexity comes from the time discretization error for AAPITE or BE. It can be reduced to $(1/\varepsilon)^{1/p}$ for some integer p if p th-order time discretization methods and p -th order Suzuki-Trotter formula are used.

- 時間発展方程式の量子解法には、QLSAs(含HHLアルゴリズム)に比べ、PITE 法が優れる(N に関する加速).
- グリッド数に関して最良指数的に加速する近似手法: AAPITE 法を提案した.
- 本手法は FDM, FEM などの離散化法への適用も可能である. 今回は、オラクルの効率良い回路実装が可能な FSM + AAPITE + Suzuki-Trotter 分解を組み合わせた手法を提案して、指数加速を実証した.

展望と課題

- 本手法は、さらに連立微分方程式に拡張することも可能である.
- 時間ステップごとに解の読出しが可能であれば、非線型方程式も取り扱える. e.g. (viscous) Burgers' equation.
- FEM を考慮する場合、オラクルの効率良い構築法が重要な課題.



- **(Main manuscript)** X. H., H. Nishi, T. Kosugi, Y. Kawada, Y. Matsushita. A probabilistic imaginary-time evolution quantum algorithm for advection-diffusion equation: Explicit gate-level implementation and comparisons to quantum linear system algorithms. Preprint. arXiv:2409.18559v2
- **(HHL algorithm)** A.H. Harrow, A. Hassidim, S. Lloyd. Quantum algorithm for linear systems of equations. Phys. Rev. Lett. 103, 2009, 150502. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.150502>
- **(Sparse CG method)** Y. Saad. Iterative methods for sparse linear systems. Second edition. SIAM, 2003. <https://doi.org/10.1137/1.9780898718003>
- **(One best-order QLSA)** H. Krovi. Improved quantum algorithms for linear and nonlinear differential equations. Quantum 7, 2023, 913. <https://doi.org/10.22331/q-2023-02-02-913>
- **(Diagonal unitary matrices)** X. H., T. Kosugi, H. Nishi, Y. Matsushita. Approximate real-time evolution operator for potential with one ancillary qubit and application to first-quantized Hamiltonian simulation. Quantum Inf. Process. 24, 2025, 85. <https://doi.org/10.1007/s11128-025-04697-7>

ご清聴ありがとうございました