

Quantum Gradient Flow Algorithmによる 逆関数近似を用いない逆行列計算

arXiv:2512.09623



○寺島悠登^{1,2)}, 門脇正史^{1,3)}, 鈴木洋一¹⁾, 遠藤克浩^{4,1)}

¹⁾ 産業技術総合研究所 G-QuAT

²⁾ 慶應義塾大学大学院理工学研究科

³⁾ 株式会社デンソー

⁴⁾ 産業技術総合研究所マテリアル DX 研究センター

誤り耐性量子コンピュータへの取り組み

- ✓ 量子誤り訂正が部分的に実現 [1].
- ✓ ハード・ソフトの両面からのアプローチが重要.
- ✓ FTQC* を見据えた研究開発が必要.

(a) System One



(b) System Two



IBM の超伝導量子コンピュータ.

量子優位性のあるアプリは未実装

- ✓ 量子デバイスが古典コンピュータよりも有効に機能する **学術的事例は存在** する [2].
- ✓ 量子デバイス (FTQC) による **数値解析** に着目する.
- ✓ 計算力学を専門とする研究者として、数値解析の根本となる **逆行列計算** を検討する.

* Fault-Tolerant Quantum Computing

[1] D. Bluvstein et al., Nature 626, 58-65 (2024).

[2] 西森秀稔, 「量子コンピュータへの期待と現実」,
https://note.com/nishimori_h/n/n06afa20837b6,

2026/4/24, 参照 2026/5/8

計算力学では**有限要素法 (Finite Element Method, FEM)** が数値解析手法として用いられる。

- 弱形式化により，自由表面 (Neumann 境界条件) の処理が非常に簡便。

$$\Delta \mathbb{C} \mathbf{u} = -\mathbf{f}$$

$$\int_{\Omega} (\Delta \mathbb{C} \mathbf{u}) \cdot \mathbf{v} \, d\Omega = - \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega$$

$$\int_{\Omega} (\nabla \mathbb{C} \mathbf{u}) \cdot \nabla \mathbf{v} \, d\Omega = \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \, d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{v} \cdot \left(\frac{\mathbb{C} \partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{n}} \right) d\Omega$$

試行関数の重み付け

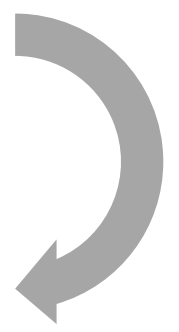
積分・発散公式

- 強制変位 (Dirichlet 境界条件) により**大まかな解**は逆行列計算をする前に分かっていることが多い。
- 剛性行列 **K** が**正定値行列**であるような**線型方程式 $K\mathbf{u} = \mathbf{f}$** に落とし込める。

これらの性質をうまく組み込んだ線形ソルバーを考えたい。

任意の**正定値行列** K に関する**線型方程式** $Ku = f$ の解 u を求める問題を考える.

量子計算分野では, 量子固有値変換 (Quantum Eigenvalue Transformation, **QET**) [3,4]を用いて, 逆関数 $1/x$ を近似する方法 (Quantum Matrix Inverse Algorithm, **QMIA**) が提案されてきた.


$$u^* = K^{-1}f$$
$$u^* = \sum_i \frac{1}{\lambda_i} f_i^v |v_i\rangle$$
$$K = \sum_i \lambda_i |v_i\rangle\langle v_i|$$
$$f = \sum_i f_i^v |v_i\rangle$$

QET では, 固有値に関して量子計算の制約を満たしながら, 多項式関数近似を実施する.

[3] J. M. Martyn et al., PRX Quantum 2.4, 040203 (2021).

[4] A. Gilyén et al., Proceedings of the 51st annual ACM SIGACT symposium on theory of computing (2019).

QMIA の条件数依存問題

1. 背景

QMIAでは $1/x$ の近似関数として、量子計算制約を保持する以下の関数 $g_{\kappa,\epsilon}^{\text{inv}}(x)$ が用いられている。

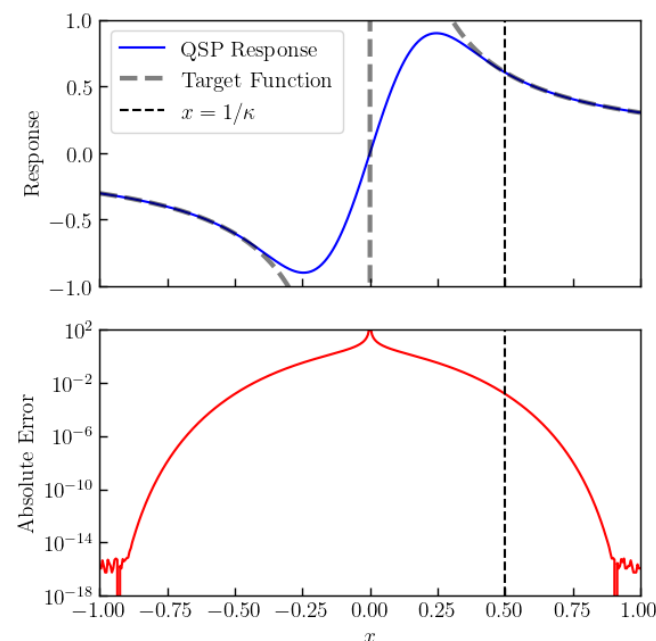
$$g_{\kappa,\epsilon}^{\text{inv}}(x) = \frac{1 - (1 - x^2)^{\kappa^2 \log(\kappa/\epsilon)}}{x}$$

要求精度 ϵ ，条件数 κ （最大固有値/最小固有値）としたときに逆関数 $1/x$ に必要とされる QET で必要な次数 d は以下の通りである [3,4].

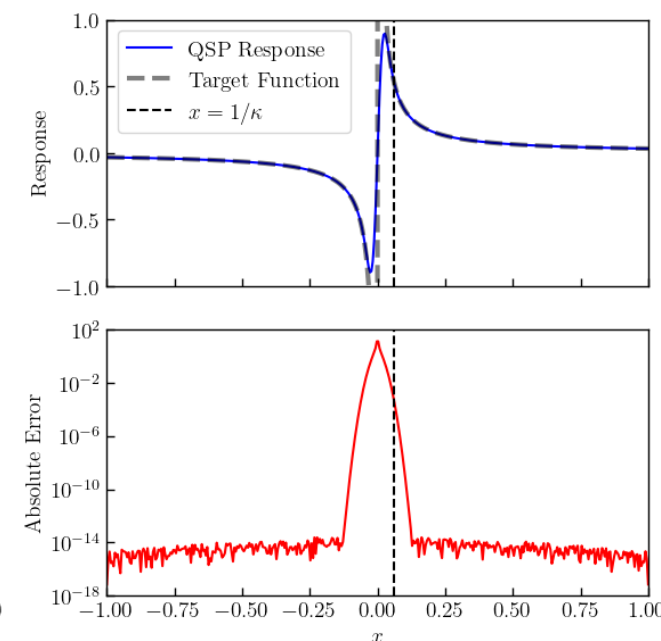
$$d \propto \mathcal{O}(\kappa \log(\kappa/\epsilon))$$

→ 次数 d が大きい場合、量子回路が深くなり、量子優位性を得ることは困難（条件数依存問題）。

(a) $\kappa = 2, \epsilon = 0.01$
→ $d = 42$

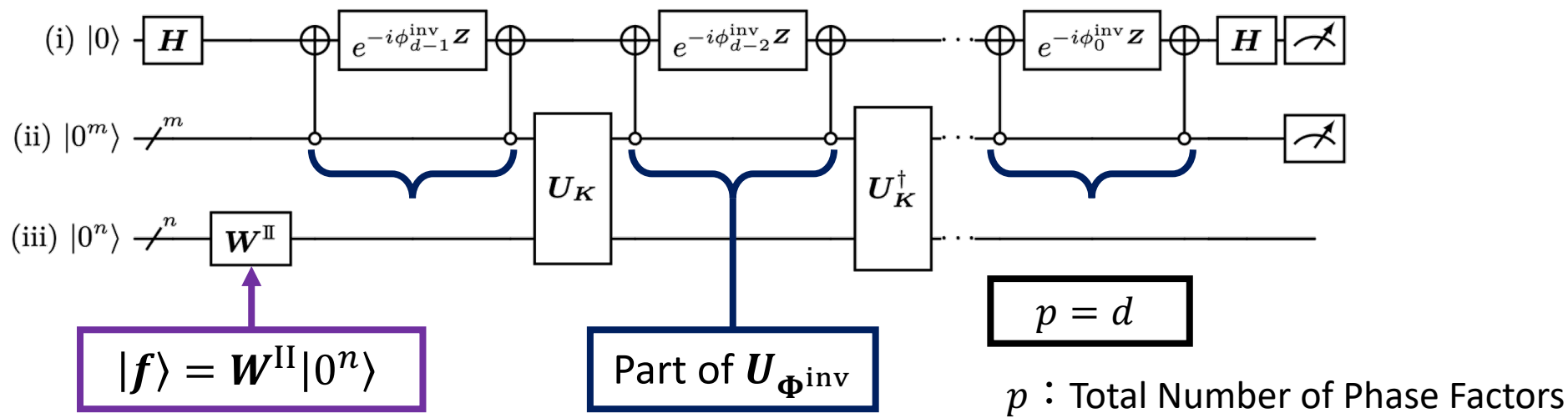


(b) $\kappa = 16, \epsilon = 0.01$
→ $d = 2280$



[3] J. M. Martyn et al., PRX Quantum 2.4, 040203 (2021).

[4] A. Gilyén et al., Proceedings of the 51st annual ACM SIGACT symposium on theory of computing (2019).



次数 d の QET 多項式近似関数に必要な位相数 p は $p = d$ である。

QMIA では条件数 κ および要求精度 ϵ に応じて $p \propto \mathcal{O}(\kappa \log(\kappa/\epsilon))$ で増えていき、回路が深くなる。

$$\mathbf{u}_{qc}^{inv}(p) = \beta \text{P}_{QET}[g_{\kappa,\epsilon}^{inv}(\tilde{\mathbf{K}})]_{d-1} \mathbf{W}^{II}|0^n\rangle, \beta = t\|\mathbf{f}\|/\|\mathbf{K}\|$$

$\text{P}_{QET}[\cdot]_{d-1}$: QET Polynomial
 $\mathbf{W}^{II}$: State Preparation Unitary
 $\mathbf{U}_{\Phi^{inv}}$: QET Unitary

* 本研究はブロックエンコーディングの内部実装については実施しない。

任意の**正定値行列** K に関する**線型方程式** $Ku = f$ の解 u を求める問題を考える.

解 u は線型方程式の**エネルギー (変分) 形式** $\Pi(u)$ の**極小 (最小) 解**として得られる.

$$\Pi(u) = \frac{1}{2} u^T K u - f u \qquad \frac{\partial \Pi(u)}{\partial u} = K u - f = 0$$

この事実より, 共役勾配法等の反復法などが収束性の高い (古典) アルゴリズムとして活用されている.

本研究では, 量子アルゴリズムにおいてエネルギー勾配に着想を得た逆行列計算手法 (**Quantum Gradient Flow Algorithm, QGFA**) を考案し, 量子回路を提案する.
そして正定値行列 K に関する線型方程式 $Ku = f$ の**条件数依存問題**を改善する.

* 本研究はブロックエンコーディングの内部実装については実施しない.

任意の**正定値行列** K に関する**線型方程式** $Ku = f$ の解 u を求める問題を考える.

解 u は線型方程式の**エネルギー (変分) 形式** $\Pi(u)$ の**極小 (最小) 解**として得られる.

$$\Pi(u) = \frac{1}{2} u^T K u - f u \qquad \frac{\partial \Pi(u)}{\partial u} = Ku - f = 0$$

ここで, 解 u は $\Pi(u)$ の最小値に向かっていくような**時間発展方程式**によって求めることも可能である.

$$\frac{du(t)}{dt} = - \frac{\partial \Pi(u)}{\partial u} = - Ku(t) + f$$

この微分方程式の解析解は下記のような**緩和過程**として表現することができる.

$$u(t) = e^{-Kt} u(0) + K^{-1} (I - e^{-Kt}) f$$

$$u(t) \Big|_{t=\infty} = u^* = K^{-1} f$$

$$\mathbf{u}(t) = e^{-Kt}\mathbf{u}(0) + K^{-1}(I - e^{-Kt})\mathbf{f}$$

$$\mathbf{u}(t) = \sum_i \left(\underbrace{e^{-\lambda_i t}}_{g_1(\lambda_i)} u_i^v + \underbrace{\frac{1 - e^{-\lambda_i t}}{\lambda_i}}_{g_2(\lambda_i)} f_i^v \right) |v_i\rangle$$

$$K = \sum_i \lambda_i |v_i\rangle\langle v_i| \quad \mathbf{u}(0) = \sum_i u_i^v |v_i\rangle \quad \mathbf{f} = \sum_i f_i^v |v_i\rangle$$

- QET 回路では，固有値に関する多項式関数設計に落とし込める．

$$\mathbf{u}(t) \Big|_{t=\infty} = \mathbf{u}^* = \sum_i \underbrace{\frac{1}{\lambda_i}}_{g_{K,\epsilon}^{\text{inv}}(\lambda_i)} f_i^v |v_i\rangle$$

QET の枠組みを用いて，それぞれ $g_1(\lambda_i)$ および $g_2(\lambda_i)$ の多項式近似を行い，解の性質を議論する．

QET (より正確には Quantum Signal Processing, QSP)による関数近似を実施する上で注意すべき点.

- 滑らかな偶関数または奇関数であること.

$$g_1(s(x, \varepsilon)) = e^{-ts(x, \varepsilon)}$$

Soft Absolute 関数 $s(x, \varepsilon)$ による偶関数化.

$$g_2(s(x, \varepsilon)) = \frac{1 - e^{-ts(x, \varepsilon)}}{s(x, \varepsilon)}$$

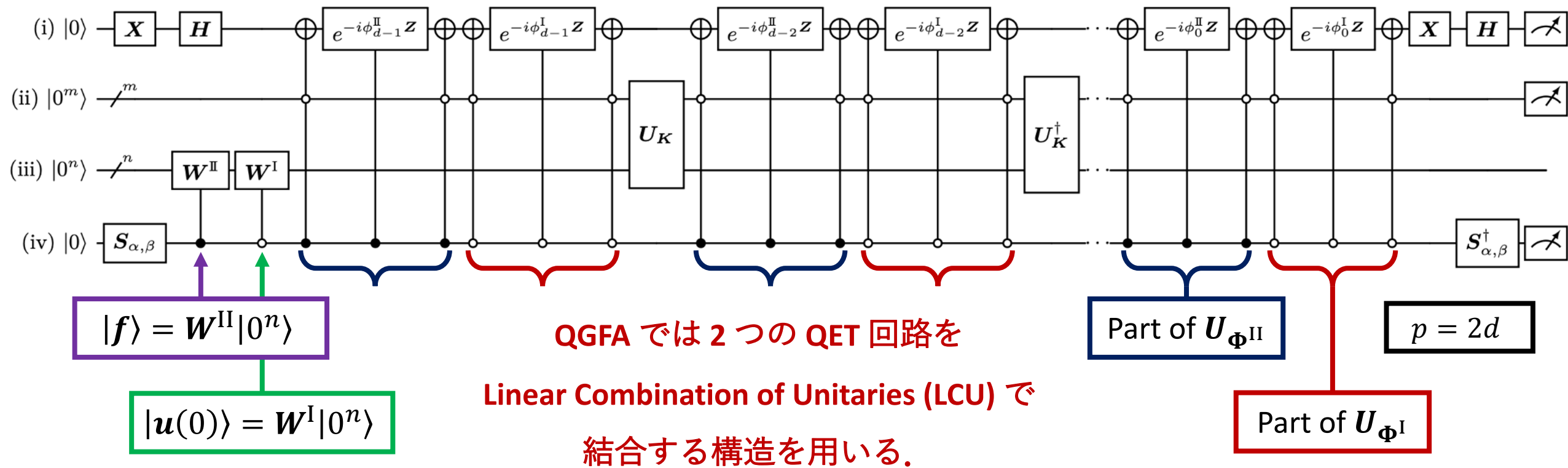
$$|x| \approx s(x, \varepsilon) = \varepsilon \left\{ \ln \left(e^{\frac{x}{\varepsilon}} + e^{-\frac{x}{\varepsilon}} \right) \right\}$$

- $\|g(x)\| \leq \mathbf{1}$ ($x \in [-1, 1]$) が満たされていること.

$$\lim_{x \rightarrow 0} g_2(x) = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{1 - e^{-tx}}{x} = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{1 - \left\{ 1 - tx + \frac{(tx)^2}{2!} - \frac{(tx)^3}{3!} + \dots \right\}}{x} = \lim_{x \rightarrow 0} \left(t - \frac{t^2 x}{2!} + \frac{t^3 x^2}{3!} - \dots \right) = t$$

スケーリングを行った関数を用いる.

$$\widetilde{g}_2(x, \varepsilon) = \frac{g_2(s(x, \varepsilon))}{t} = \frac{1 - e^{-ts(x, \varepsilon)}}{ts(x, \varepsilon)}$$

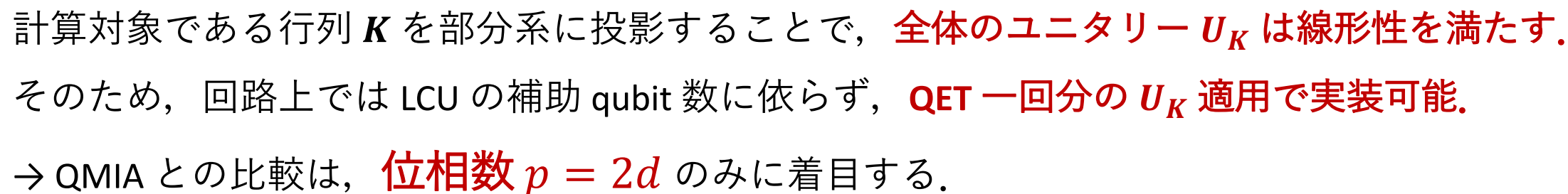


$$\mathbf{u}_{\text{qc}}(p, t) = \underbrace{\alpha \text{P}_{\text{QET}} \left[g_1 \left(s(\tilde{\mathbf{K}}, \varepsilon) \right) \right]_{d-1}}_{\alpha = \|\mathbf{u}(0)\|} \underbrace{\mathbf{W}^I |0^n\rangle}_{\text{green}} + \underbrace{\beta \text{P}_{\text{QET}} \left[\widetilde{g}_2 \left(s(\tilde{\mathbf{K}}, \varepsilon) \right) \right]_{d-1}}_{\beta = t\|\mathbf{f}\|/\|\mathbf{K}\|} \underbrace{\mathbf{W}^{II} |0^n\rangle}_{\text{purple}},$$

$\mathbf{W}^I$ and $\mathbf{W}^{II}$: State Preparation Unitary

$\mathbf{U}_{\Phi I}$ and $\mathbf{U}_{\Phi II}$: QET Unitary

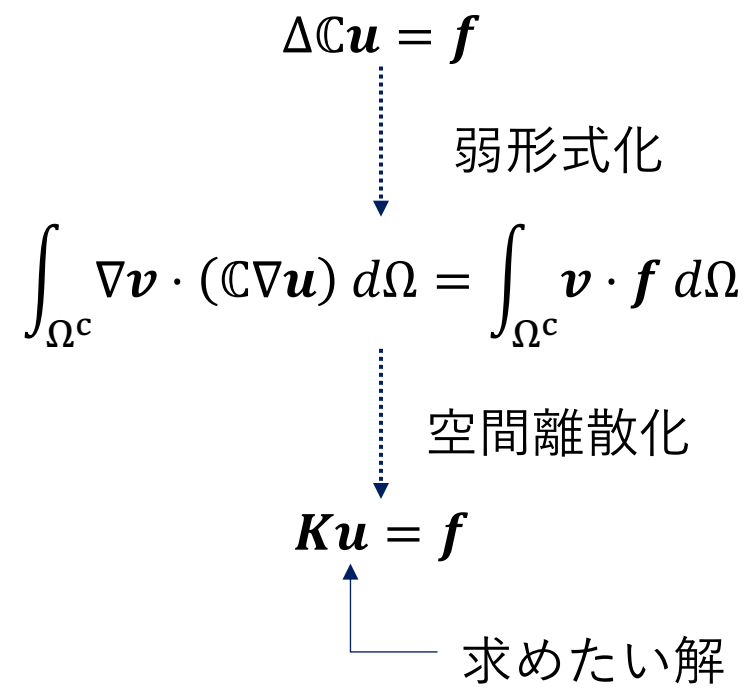
* 本研究はブロックエンコーディングの内部実装については実施しない.



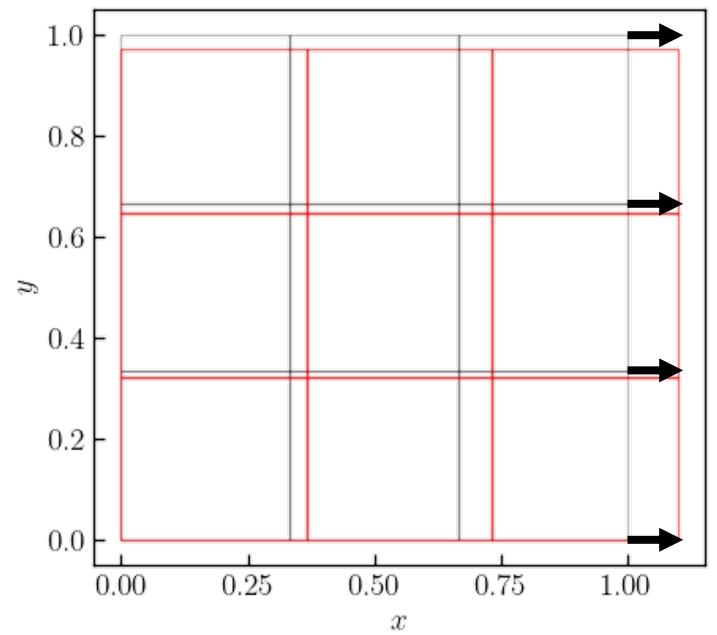
QGFA による有限要素変形解析

QGFA を活用し，状態ベクトルのユニタリ時間発展として，引張解析および曲げ解析を実施する。

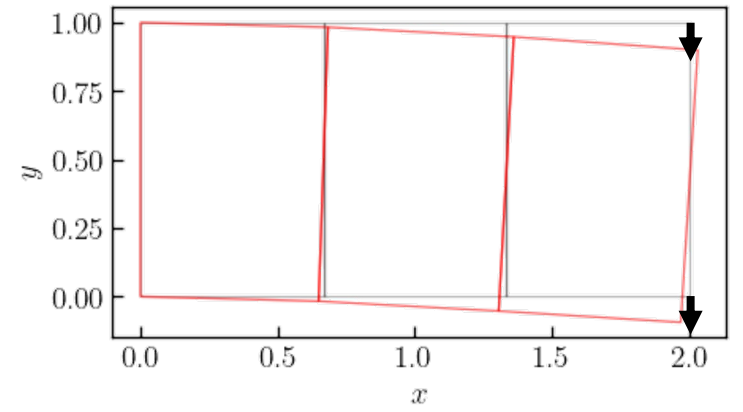
- Young 率および Poisson 比はそれぞれ 0.2 および 0.3 とする．条件数は $\kappa \sim 30$ 程度になる．
- 2次元 1.00×1.00の領域を考え，10% 引張りおよび 10% 曲げを考える．



(a) $N = 9$ の引張解析



(b) $N = 3$ の曲げ解析



$\mathbb{C}$: Elastic Compliance Tensor
 $\mathbf{v}$: Weight Function (Virtual Displacement)

変形解析の結果．（黒枠：変形前，赤枠：変形後）

QGFA から期待される結果

様々な位相数 p および時間発展パラメータ t の組に対し、

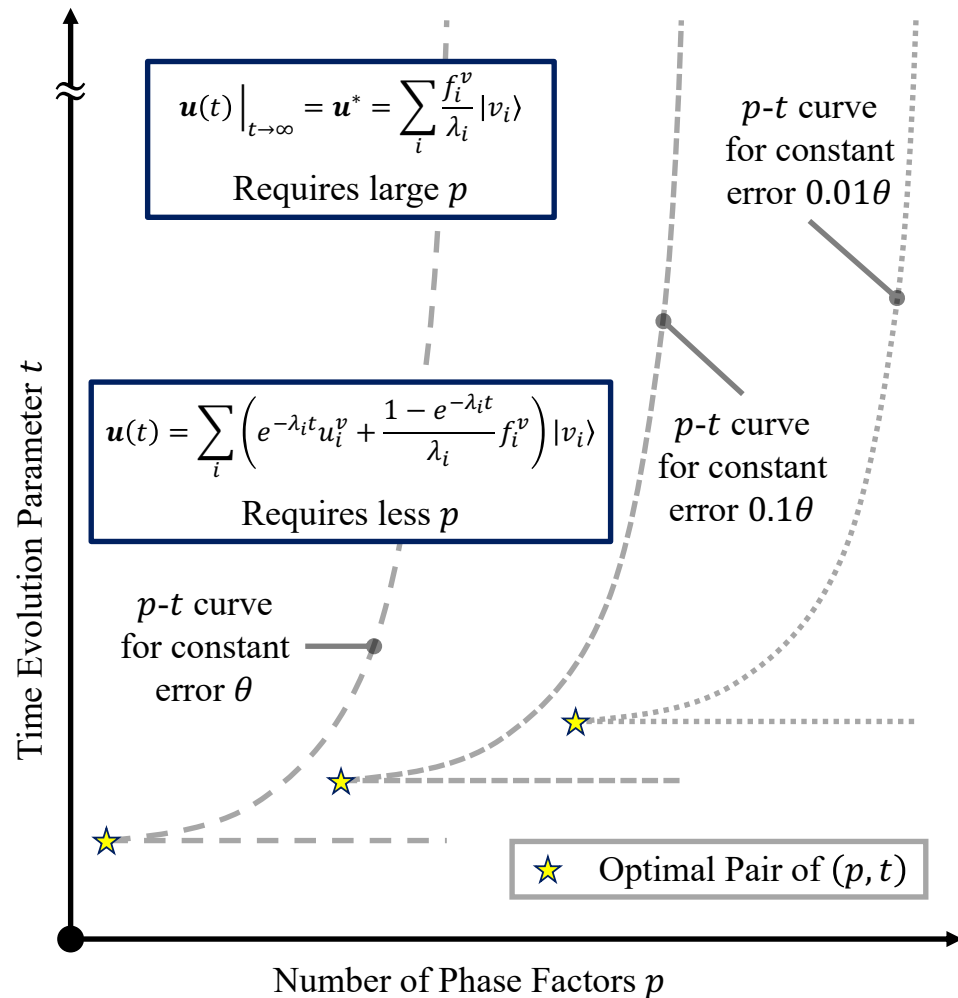
QGFA で求められた解 $\mathbf{u}_{\text{qc}}(p, t)$ を計算する。

このとき厳密解 $\mathbf{u}^*$ との相対誤差 $\mathcal{R} = \|\mathbf{u}_{\text{qc}}(p, t) - \mathbf{u}^*\| / \|\mathbf{u}^*\|$ を pt 平面上にプロットし、誤差の等高線を観察する。

同様に様々な位相数 p に対し、QMIAで求められた解 $\mathbf{u}_{\text{qc}}^{\text{inv}}(p)$

および相対誤差 $\mathcal{R}^{\text{inv}} = \|\mathbf{u}_{\text{qc}}^{\text{inv}}(p) - \mathbf{u}^*\| / \|\mathbf{u}^*\|$ を求める。

$g_1(s(x, \varepsilon))$ および $\widehat{g}_2(s(x, \varepsilon))$ が $g_{K, \varepsilon}^{\text{inv}}(x)$ と比較して滑らかであるため、同程度の許容誤差の中で、最適な (p, t) の組み合わせが存在すると予想される（右図）。



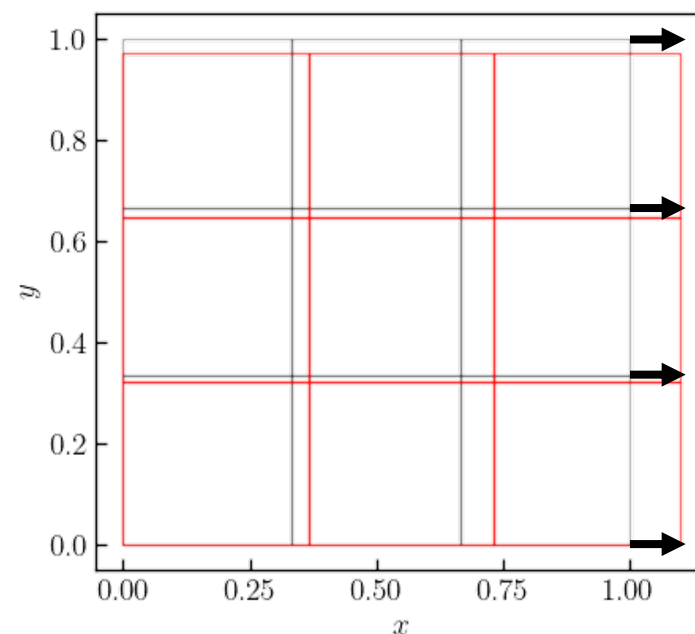
QGFA を活用した引張解析において時間発展型線型方程式の解法の性質について議論する。

- 位相パラメータ Φ の次数 d および時間発展パラメータ t を変数として誤差分布を求める。
- 誤差の等高線は **U 字の曲線を描き**, **t が大きくなることで p は有界な一定値に向かって大きくなる**。
- t が小さな領域 (300-500) では, 位相数 p の増加に伴う精度改善は見られない領域が存在する。

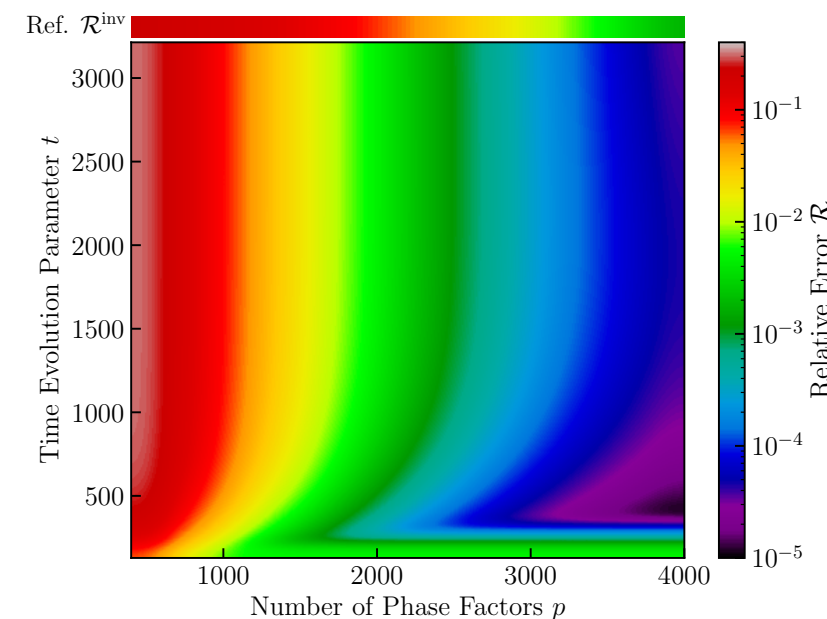
$$\mathcal{R} = \frac{\|\mathbf{u}_{\text{qc}}(p, t) - \mathbf{u}^*\|}{\|\mathbf{u}^*\|}$$

$$\mathcal{R}^{\text{inv}} = \frac{\|\mathbf{u}_{\text{qc}}^{\text{inv}}(p) - \mathbf{u}^*\|}{\|\mathbf{u}^*\|}$$

(a) $N = 9$ の単純引張解析



(b) pt 平面上の相対誤差分布



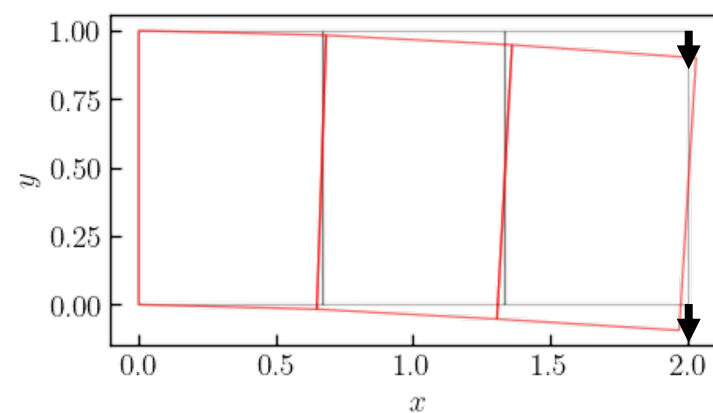
QGFA を活用した曲げ解析において時間発展型線型方程式の解法の性質について議論する。

- 傾向は引張解析の結果と同等であるが，条件数 κ が上昇しており分布のオーダーが変化している。
- $p = 4000$ においては，QMIA に対して QGFA が最大 10^3 倍程度，精度改善している。

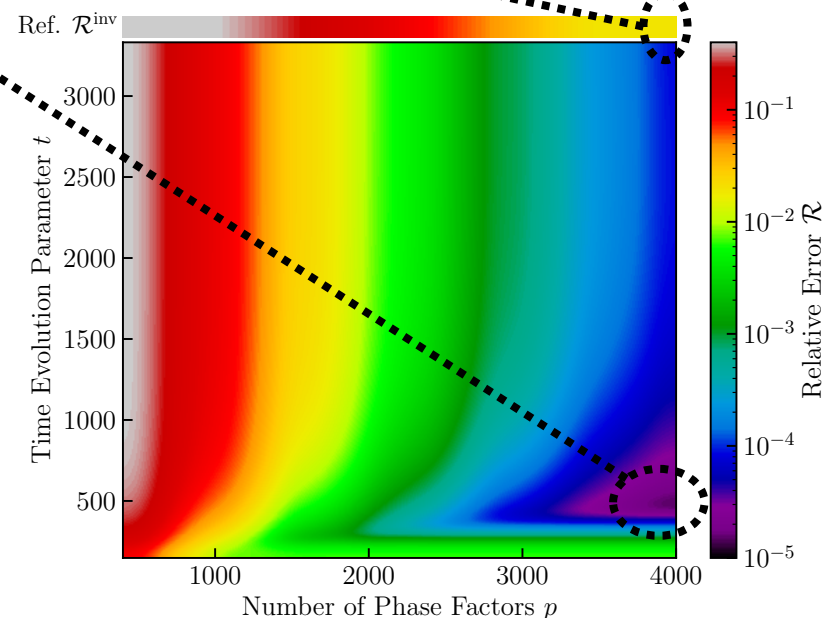
$$\mathcal{R} = \frac{\|\mathbf{u}_{\text{qc}}(p, t) - \mathbf{u}^*\|}{\|\mathbf{u}^*\|}$$

$$\mathcal{R}^{\text{inv}} = \frac{\|\mathbf{u}_{\text{qc}}^{\text{inv}}(p) - \mathbf{u}^*\|}{\|\mathbf{u}^*\|}$$

(a) $N = 3$ の曲げ解析



(b) pt 平面上的相対誤差分布



本研究の成果は以下の3点に集約される。

- ✓ SPD 線型方程式系を緩和過程の時間発展として解く量子アルゴリズム, **QGFA**を提案した.
- ✓ QET および LCU により**量子回路を構築**した.
- ✓ 条件数 κ が大きな問題に対しても時間発展パラメータ t を調節することで少ない位相数 p にて求解できることを明らかにした.

本研究の arXiv preprint のリンク→

