

令和 4 年 5 月 19 日現在

機関番号：14401

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2020～2021

課題番号：20K22330

研究課題名（和文）第一原理計算応用に向けた量子回路パラメータの効率的な初期化方法の構築

研究課題名（英文）Development of parameter optimization strategies of quantum circuits for ab-initio calculations

研究代表者

御手洗 光祐 (Mitarai, Kosuke)

大阪大学・基礎工学研究科・助教

研究者番号：50855111

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 1,500,000円

研究成果の概要（和文）：量子コンピュータを量子化学計算に応用するための有力な手法である変分量子固有値ソルバは、パラメータ付きの量子回路を用いて、そのパラメータを順次最適化していくことにより物質で実現している量子状態を再現する手法である。本研究課題では、このパラメータ最適化を古典コンピュータ上の摂動論によって行い、効率的に最適なパラメータを見つける手法を構築した。理論の定式化後数値検証を行い、提案手法の有効性を確認した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

量子コンピュータの最も最初の応用先として、量子化学計算が有望視されており、特に近未来量子コンピュータの利用方法として有力なのが変分量子固有値ソルバである。本研究はこれに対して効率的なパラメータの最適化方法を構築できたため、量子コンピュータの実応用に向けた一歩となるものである。また本手法は古典コンピュータ上ではほぼ最適なパラメータやエネルギー値を得ることもできるため、変分量子固有値ソルバの簡易的なベンチマーク手法としても利用でき、ある与えられた問題への量子コンピュータの利用価値を古典的にある程度検証できる可能性もある。

研究成果の概要（英文）：Variational quantum eigensolver is a promising candidate for applying quantum computers to quantum chemistry calculations. It uses parameterized quantum circuits whose parameters are iteratively optimized to generate a target quantum state which is realized in real materials. In this project, a novel parameter optimization strategy that is based on a perturbative expansion of the energy expectation value on a classical computer has been developed. After mathematical formulation of the idea, the strategy is successfully tested numerically on model molecules.

研究分野：量子計算

キーワード：量子計算 量子化学 第一原理計算

1. 研究開始当初の背景

量子力学の誕生以来、与えられたハミルトニアン of 正確な固有状態を計算し、物質の性質を明らかにするために様々な努力が続けられてきた。テンソルネットワークやニューラルネットワークの使用など、従来とは異なるアプローチに基づく量子状態の構築も盛んに行われている。近年では、量子コンピュータの実現を目指す実験の発展とも相まって、高精度で制御可能な量子系の上に、所望の量子状態を作り出すというアプローチが注目を浴び始めている。十分精度良く制御可能な量子系であれば、従来の計算機ではその動作をつぶさに追うことは難しいと信じられて [1] いるため、このアプローチによればこれまで探索が困難であった量子状態を構築し、それを物質の第一原理計算などに応用できる可能性がある。

これを近未来の量子デバイスで実現する枠組みの一つに、Variational Quantum Eigensolver (VQE) [2] がある。VQE は、変分パラメータ θ を持つ量子状態 $|\psi(\theta)\rangle$ を量子デバイス上で生成し、 θ を調整しながら、目的の物理系のハミルトニアン H の期待値 $E(\theta) = \langle\psi(\theta)|H|\psi(\theta)\rangle$ を最小化することで、変分的に近似的な基底状態を見つけ出す。変分パラメータ θ は、量子状態生成のための量子操作 = 量子回路をこのパラメータに依存させることで埋め込まれる。

VQE は近未来量子デバイスの応用先として最も有望視されているものの、これを物理的に興味のある問題に適用するには未だ課題が多く残されている。特に重要な課題は、変分パラメータ θ の初期値決定方法の構成である。これまでに実験実証や数値検証の報告は数多くある [2] が、多くの場合、初期パラメータは完全にランダムに選ばれている。当然のことながら、完全にランダムな初期化では、初期パラメータが最適値から遠く離れた場所には選ばれる可能性が大きく、実用的でない。そればかりか、このようにランダムな初期化を行うと、問題のサイズの増大に伴い、初期パラメータ周辺におけるエネルギー変化が 0 になる、すなわち最適化すべき目的関数の勾配が消失してしまう、という問題が示されている [3]。したがって、VQE によって量子デバイスの能力をスケラブルに引き出すには、これらの問題を回避するような初期化方法の構成が必須である。

この問題に取り組んだ先行研究は、これまでに変分パラメータの初期値の決定方法を提案する文献は [4] のみしかなかった。[4] では、ランダムにパラメータを選んで勾配消失が起きないように、特殊な量子回路形を提案するにとどまっていた。

2. 研究の目的

本研究は、量子デバイスの物性解析への応用実現を加速し、従来の計算機・計算手法では困難であった量子系の解析を可能とするべく、VQE の効率的な初期化方法を構築することを目的とした。具体的には、量子回路への入力状態が、平均場計算などによってある程度良い近似的な基底状態になっているという想定の下に、与えられたパラメータ付き量子回路に対応した摂動論的手法を展開することで、初期パラメータの決定を実行する手法を構築することを目指した。

3. 研究の方法

理論的な定式化を試み、量子回路シミュレータを用いたその数値検証によって研究を進めた。特に数値検証では、VQE の実応用が期待されている量子化学の分野を念頭に置き、モデル分子系でその有効性を検証した。

4. 研究成果

当初期待していたとおり、摂動論的にパラメータ付き量子回路の変分パラメータを最適化する手法を得ることができた。具体的には、次のような手法を考案した。まず、パラメータ $\theta = 0$ の点で量子回路がクリフォード回路であることを仮定する。クリフォード回路はパウリ演算子をパウリ演算子に移すような回路のことで、Gottesman-Knill の定理によって古典コンピュータでも効率的にシミュレートできることがよく知られている。このとき、パラメータ付きのゲートが $R(\theta) = e^{i\theta P}$ の形をしていれば、量子回路の $\theta = 0$ における n 回微分もまたクリフォード回路となって、これも効率的にシミュレート可能となる。このことを用いることにより、 $\theta = 0$ におけるエネルギー期待値 $E(\theta)$ の微分値 $\partial E/\partial\theta \cdot \partial^2 E/\partial\theta^2$ を古典シミュレーションによって求められる。これによって $E(\theta)$ の $\theta = 0$ まわりでのテイラー展開を行い、エネルギーが最小値を取る点を見つければ、摂動論的に θ の最適化が可能となる。

定式化した理論を検証するため、量子化学計算への応用を念頭に置き、1次元の水素分子鎖をモデル分子系として数値シミュレーションを行った。図1のように、現在の実機でも実行可能な量子回路の形を仮定し、本提案手法がどのような振る舞いをするか調べた。結果として、ほとんどの場合において、本提案手法によってほぼ最適なパラメータ θ を発見できることが明らかとなった。つまり提案手法は、パラメータの初期化に用いるという元来の目的を超えて、古典コン

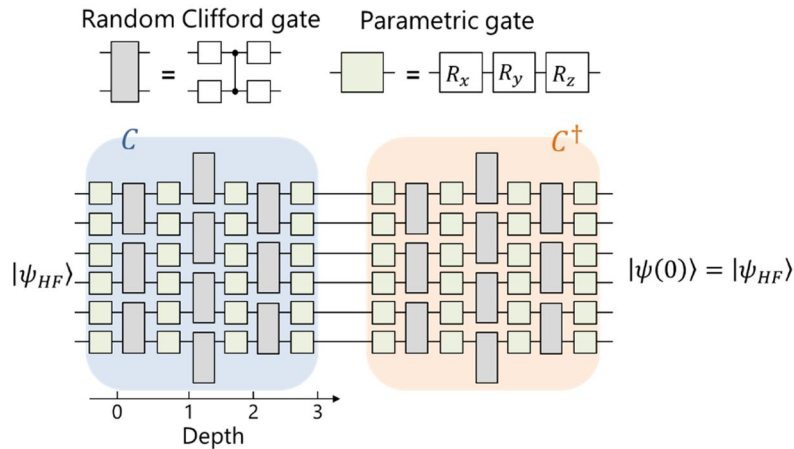


図1 数値検証のために用いた量子回路。 $|\psi_{HF}\rangle$ はハートリーフォック状態を示す。

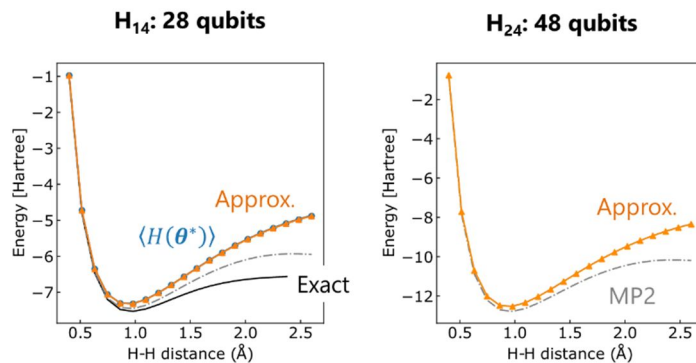


図2 提案手法を応用した、大きな系における VQE の性能検証。オレンジの点が本手法によって得られた近似的なエネルギー値を示す。青の点は得られた最適化パラメータを用いて厳密なエネルギー期待値を計算した結果、灰色の破線は一般に利用されている摂動論の計算手法である 2 次のメラー=プレセット法 (MP2) の計算結果である。

コンピュータ上で VQE のパラメータ最適化をほぼ終わらせる。この手法によって見つけれられた最適なパラメータにおける近似的なエネルギー期待値も、古典コンピュータ上で得ることができるため、ある意味では、量子情報の考え方にインスパイアされた摂動手法としての価値もあると考えられる。また、本手法でパラメータが最適化しきれない場合であっても、得られた近似的な最適パラメータから VQE を行えば、量子コンピュータの使用回数を削減できることも数値的に示すことができた。これは本手法が、元々の目的であった効率的なパラメータ初期化についても有用であることを示すものである。

加えて、本手法が古典コンピュータ上でシステムサイズに対して多項式時間で動く手法であり、かつほぼ最適なパラメータを見つけることが可能であるという特徴を活かすことで、これまで検証されていなかったような大規模な VQE アルゴリズムについても、その性能の検証を行った。図 2 にその数値計算結果を示す。これまで 48 量子ビット系のような大きな系でベンチマークを取ることは不可能であったが、本手法によってこれが可能となった。結果から、図 1 のような回路を用いる VQE では水素分子鎖のような簡単なモデル系であっても、一般的に利用されている摂動論に対して優位性が無いことが確認された。これ現状のハードウェアで実行可能な VQE の有用性について疑問符を投げかける結果であり、量子化学計算への VQE の実応用にはまだまだ理論的な検討を行っていく必要があることを示唆している。

参考文献

- [1] A. Bouland, *et al.*, arXiv: 1803.04402; F. Arute, *et al.*, Nature, **574**, 505-510 (2019).
- [2] S. McArdle, *et al.*, Rev. Mod. Phys., **92**, 015003 (2020).
- [3] J. R. McClean, *et al.*, Nat. Comm., **9**, 4812 (2018).
- [4] E. Grant, *et al.*, Quantum, **3**, 214 (2019).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 0件／うち国際共著 0件／うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Mitarai Kosuke, Fujii Keisuke	4. 巻 5
2. 論文標題 Overhead for simulating a non-local channel with local channels by quasiprobability sampling	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Quantum	6. 最初と最後の頁 388 ~ 388
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.22331/q-2021-01-28-388	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Mitarai Kosuke, Fujii Keisuke	4. 巻 23
2. 論文標題 Constructing a virtual two-qubit gate by sampling single-qubit operations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 New Journal of Physics	6. 最初と最後の頁 023021 ~ 023021
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1367-2630/abd7bc	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Takaki Yuto, Mitarai Kosuke, Negoro Makoto, Fujii Keisuke, Kitagawa Masahiro	4. 巻 103
2. 論文標題 Learning temporal data with a variational quantum recurrent neural network	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 52414
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/physreva.103.052414	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kusumoto Takeru, Mitarai Kosuke, Fujii Keisuke, Kitagawa Masahiro, Negoro Makoto	4. 巻 7
2. 論文標題 Experimental quantum kernel trick with nuclear spins in a solid	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 npj Quantum Information	6. 最初と最後の頁 94
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41534-021-00423-0	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Cerezo M., Arrasmith Andrew, Babbush Ryan, Benjamin Simon C., Endo Suguru, Fujii Keisuke, McClean Jarrod R., Mitarai Kosuke, Yuan Xiao, Cincio Lukasz, Coles Patrick J.	4. 巻 3
2. 論文標題 Variational quantum algorithms	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Nature Reviews Physics	6. 最初と最後の頁 625 ~ 644
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s42254-021-00348-9	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hakkaku Shigeo, Mitarai Kosuke, Fujii Keisuke	4. 巻 3
2. 論文標題 Sampling-based quasiprobability simulation for fault-tolerant quantum error correction on the surface codes under coherent noise	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 43130
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/physrevresearch.3.043130	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計16件 (うち招待講演 7件 / うち国際学会 13件)

1. 発表者名 Naixu Guo , Kosuke Mitarai , Keisuke Fujii
2. 発表標題 Nonlinear transformation of complex amplitudes via quantum singular value transformation
3. 学会等名 Asian Quantum Information Science 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Mitsuki Katsuda , Kosuke Mitarai , Keisuke Fujii
2. 発表標題 Full simulation of fault-tolerant quantum error correction under general noise for near-term quantum devices
3. 学会等名 Asian Quantum Information Science 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Ryotaro Suzuki , Kosuke Mitarai , Keisuke Fujii
2. 発表標題 Computational power of dual-unitary quantum circuits
3. 学会等名 Asian Quantum Information Science 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Shoya Takagi , Kosuke Mitarai , Keisuke Fujii
2. 発表標題 Quantum error correction with adaptive syndrome measurements
3. 学会等名 Asian Quantum Information Science 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 御手洗光祐, 鈴木泰成, 水上 渉, 中川裕也, 藤井啓祐
2. 発表標題 摂動的アプローチによる変分量子アルゴリズムの効率的初期化とベンチマーク
3. 学会等名 第43回量子情報技術研究会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kosuke Mitarai , Yasunari Suzuki , Wataru Mizukami , Yuya O. Nakagawa , Keisuke Fujii
2. 発表標題 Quadratic Clifford expansion for efficient benchmarking and initialization of variational quantum algorithms
3. 学会等名 Quantum Information Processing 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Keita Osaki , Kosuke Mitarai , Keisuke Fujii
2. 発表標題 Classically Optimized Variational Quantum Eignensolver for Topological Orderd Systems
3. 学会等名 Asian Quantum Information Science 2020 (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Fumiyoshi Kobayashi , Kosuke Mitarai , Keisuke Fujii
2. 発表標題 Parent Hamiltonian as a benchmark problem for variational quantum eigensolvers
3. 学会等名 Quantum Information Processing 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小林望 , 御手洗光祐 , 中川裕也
2. 発表標題 位相推定アルゴリズムを用いた分子のエネルギー計算にかかるコストの推定
3. 学会等名 第1回量子ソフトウェア研究発表会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kosuke Mitarai
2. 発表標題 Extending the variational quantum eigensolver for practical applications
3. 学会等名 Quantum Week of Fun - Quantum Computing × Quantum Chemistry (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 御手洗光祐
2. 発表標題 物性計算へのNISQ デバイス応用に向けたアルゴリズム
3. 学会等名 量子多体系の熱力学 --数理の発展と展望 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Kosuke Mitarai
2. 発表標題 Quantum algorithms for quantum many-body systems on near-term quantum computers
3. 学会等名 New Trends in Quantum Condensed Matter Theory (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Kosuke Mitarai
2. 発表標題 Quantum machine learning and algorithm development
3. 学会等名 Physics Frontiers with Quantum Science and Technology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kosuke Mitarai
2. 発表標題 NISQ algorithms for chemistry and machine learning
3. 学会等名 QHack 2022 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kosuke Mitarai
2. 発表標題 Development of quantum machine learning algorithms and experimental realization
3. 学会等名 Quantum Innovation 2021 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 御手洗光祐
2. 発表標題 古典シミュレート可能性を用いた古典最適化変分量子アルゴリズム
3. 学会等名 物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の新展開」(招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関