

変分量子回路の高速自動最適化ツールの開発 — 変分量子アルゴリズムの社会実装に向けて —

1. 背景

近年ゲート式量子コンピュータの熾烈な開発競争が繰り広げられている。開発されているゲート式量子コンピュータはノイズがありスケールしない量子コンピュータ(NISQ デバイス)であり、現在は、約 100 量子ビットを備えた NISQ デバイスが実現している。この飛躍的な技術的進歩により、最近では NISQ デバイス上で動く量子アルゴリズムに注目が集まりつつある。すでに量子化学計算や組合せ最適化、量子機械学習に関する量子アルゴリズムが多数考案されている。それに伴ってこれらの量子アルゴリズムの活用にも注目が集まっており、将来の大きな社会需要が期待できる可能性がある。

2. 目的

先に述べた量子アルゴリズムの多くは変分量子回路を用意してそのパラメータを最適化することで解を求める変分量子アルゴリズムである。これらの量子アルゴリズムを実際に運用する際には次の2つの問題を解決する必要がある。まず、1つ目は、変分量子回路のパラメータ最適化において、既存の最適化手法では収束までに必要な更新回数が非常に多く、計算に時間がかかることである。2つ目は、適切な変分量子回路の構成がまだ解明されておらず、どのような変分量子回路を用意すればよいのかわからないことである。

本プロジェクトは、これら2つの問題を解決するようなアルゴリズムを発明・実装し、さらに、変分量子アルゴリズムのシミュレーションに特化した量子回路シミュレータを開発して、それらを元に変分量子回路の高速自動最適化ツールを作成することを目的とする。さらにこれをパッケージとして公開することで、NISQ 用アルゴリズム開発基盤を構築する。これらを通じて古典コンピュータでは計算量的に困難な社会課題の解決を加速させる。

3. ソフトウェア開発内容

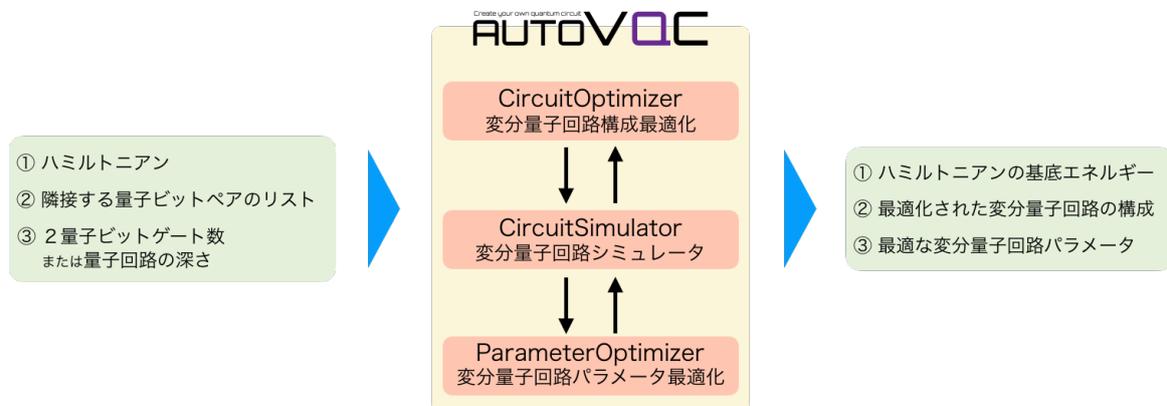


図 1 パッケージの構成図

本プロジェクトの最終成果は変分量子回路の高速自動最適化ツール「AutoVQC」である。AutoVQC は大きく分けて3つの構成要素、①変分量子回路のパラメータ最適化部、②変分量子回路の構成最適化部、③変分量子回路シミュレータ、からなる。このパッケージを用いることで、利用者は変分量子アルゴリズムについての知識が乏しくても、変分量子アルゴリズムを用いた計算ができるようになる。これによって、量子化学計算や組合せ最適化、量子機械学習などの社会実装を飛躍的に加速させることが期待できる。以下、各々の構成要素について説明する。

```
circ_opt = CircuitOptimizer(  
    # 入力① ハミルトニアン(辞書型)  
    hamiltonian={'XIXI':0.1,'XIZZ':0.3, ...},  
    # 入力② 隣接する量子ビットのペアのリスト  
    connections=[(0,1),(1,3),(2,3), ...],  
    # 入力③ 量子回路の深さ  
    n_depth=5  
)  
for i in range(10):  
    circ_opt.update() # 変分量子回路の構成を更新  
  
res = circ_opt.get_result() # 結果を出力(辞書型)  
  
# 出力① ハミルトニアンの基底エネルギー  
res['loss'] #=> -0.869...  
# 出力② 最適化された変分量子回路の構成  
res['targets_list'] #=> [(0,1),(2,3), ...],  
# 出力③ 最適化された変分量子回路パラメータ  
res['params']: #=> [6.12,3.22, ...]
```

図 2 利用例

①変分量子回路のパラメータ最適化部

最適化アルゴリズムは様々なものがあるが、最適化の対象を絞ることで、より性能の良い、特定の問題特化型の最適化アルゴリズムを作れることがある。本プロジェクトでは、変分量子回路について詳しく調べることで、変分量子アルゴリズムの最適化に有用な変分量子回路の性質に気づくことができた。そして、その性質を用いて、変分量子回路の最適化に特化した最適化アルゴリズムを考案し、既存の最適化手法との性能比較をした。また、その最適化アルゴリズムをパッケージにして公開した。

②変分量子回路の構成最適化部

変分量子アルゴリズムに用いる適切な変分量子回路としてどのような変分量子回路を用意すれば適切なのかという問題は、未だ解明されていない。そこで、回路構成を容易に探索できるよう工夫した。

③並列量子計算シミュレータ

変分量子固有値ソルバーのような変分量子アルゴリズムでは、最適化によって極小解ではなく最小解を求める必要がある。変分量子アルゴリズムでは、最小解を求めるために、初期パラメータを変えて何度か試行するということが行われる。ここで、本プロジェクトでは、この複数回の試行を古典コンピュータで効率的に計算できる形で並列化した、変分量子アルゴリズムのシミュレートに特化した量子計算パッケージを作成した。

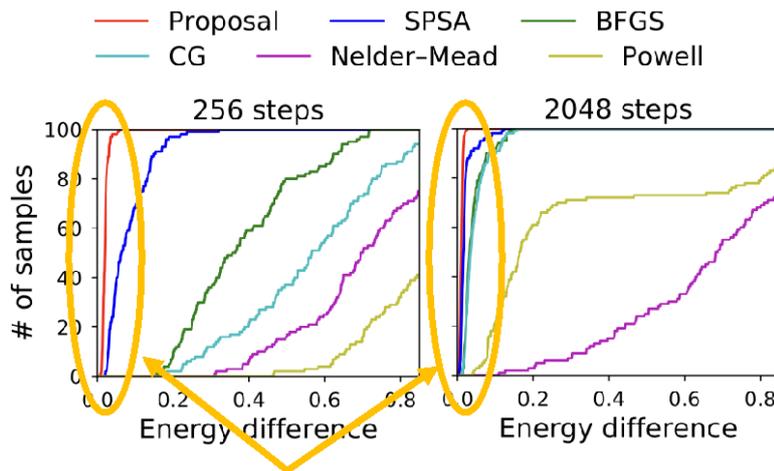
4. 新規性・優位性

①変分量子回路のパラメータ最適化部

本プロジェクトで提案した変分量子アルゴリズム向けの変分量子回路パラメータ最適化手法は既存手法に比べて収束が非常に速く、統計誤差に対して頑健で、さらに、ハイ

パラメータがないので調整の必要がないことがわかった。この手法は量子古典ハイブリッドアルゴリズムの実問題への適用を飛躍的に推し進めると期待できる。

本手法の優位性を示す例として、リチウム水素分子の基底状態を求める変分量子固有値ソルバー (VQE) の数値実験を紹介する。ハミルトニアン期待値は実験では測定で平均値で代用するため、必ず期待値の計算には統計誤差が乗る。この実験では、ハミルトニアン期待値を 1024 回の測定の平均値で近似した。その結果を以下に示す。



既存手法に比べ圧倒的に収束性能が良い

図 3 パラメータ最適化手法の数値実験

まず、この図の見方について説明する。左側のグラフは、ハミルトニアン期待値を 256 回評価した時点、右側は 2048 回評価した時点での状況を示している。シミュレーションはそれぞれ 100 回ずつ行っており、この図の縦軸は、真の基底エネルギーとの差について、100 回の試行のうちいくつかの試行が横軸の値以下のエネルギー差になったかを表している。この図から、赤線で示している提案手法は既存手法に比べて圧倒的に速く真の基底エネルギーに収束させることができるとわかる。さらに、大半の既存手法では、8 倍多く期待値を評価しても本提案手法には勝てていないことがわかる。

③ 並列量子計算シミュレータ

図4は、リチウム水素分子の基底状態を求める VQE を 1000 試行する場合の速度評価の結果である。①で提案したパラメータ最適化手法も古典コンピュータで効率的に並列可能なアルゴリズムとなっているということもあり、量子計算パッケージ QuPy の約 250 倍高速に変分量子アルゴ



図 4 量子回路シミュレータの性能評価

リズムをシミュレートできるようになった。これは、今後の変分量子アルゴリズム業界の研究や社会実装を更に加速させることにつながると期待できる。

5. 期待されるユーザー価値と社会へのインパクト

変分量子アルゴリズムは、量子化学計算や組合せ最適化、量子機械学習など、現在存在する量子コンピュータ上で動くアルゴリズムの多くを占めている。この変分量子アルゴリズムの問題点として、本報告書のここまででも書いてきたように、変分量子回路の最適化の時間の長さ・適切な変分量子回路の設計の困難さがある。本プロジェクトでは、これらの問題点を解決し、その上、高速に変分量子アルゴリズムをシミュレートできる変分量子回路シミュレータを実装した。さらに、これらをパッケージにまとめて公開した。上記の変分量子アルゴリズムの問題点を解決することは、まず、量子化学計算や量子機械学習など、NISQ を用いるあらゆる変分量子アルゴリズムを実用化に近づけることに

図 5

つながる。さらに、このパッケージによって、変分量子回路の設計が自動化され、他分野の人が参入しやすくなり、それによって、量子コンピュータの新たな応用先が多数考案されることにつながると考えられる。このように、本未踏プロジェクトで作成したアルゴリズムやパッケージは現在存在する量子コンピュータの応用研究や普及を加速させるのに欠かせないものになると考えている。

6. 氏名（所属）

中西 健 （東京大学）

（参考）関連 URL

- ・本プロジェクトで考案した変分量子回路パラメータ最適化の論文
Sequential minimal optimization for quantum-classical hybrid algorithms
<https://arxiv.org/abs/1903.12166>
- ・変分量子回路パラメータ最適化パッケージ
<https://github.com/ken-nakanishi/nftopt>
- ・変分量子回路の高速自動最適化ツール
<https://github.com/ken-nakanishi/autovqc>