

量子変分アルゴリズムの性能評価とその改良開発 —量子化学分野での実応用に向けて—

1. 背景

計算途中でのノイズは取り切れていないものの、古典的な計算機ではその動きをシミュレートすることが難しいようなゲート型量子コンピュータが、近年登場し始めている。このようなデバイスは NISQ (Noisy Intermediate Scale Quantum) デバイスと呼ばれており、計算途中のノイズのため、素因数分解など非常に多くの量子ゲートを必要とするアルゴリズムを実行することは難しい。一方で、ある特定のタスクでは古典計算機を超えるような能力を備えていることも確かである。この計算能力を活用するための手法として、量子-古典ハイブリッドアルゴリズム、もしくは変分量子アルゴリズムと呼ばれる一連のアルゴリズムが注目を浴びている。パラメータによってその構成を調整可能な「浅い」量子回路を、目的のタスクが達成できるように調整していくのがこの手法である。

変分量子アルゴリズムの中でも特に有望視されている VQE は、量子系の基底状態を求めるためのアルゴリズムである。VQE は量子状態を作り出すことを目的とするため、もし浅い量子回路によって生成できる量子状態の集合に、現実の物理系の基底状態が含まれていることが判明すれば、すぐに応用へとつながる。分子や固体物質に応用できれば、これまで理論的に解明されてこなかった化学的現象などが理解できるかもしれない。このような理由から注目を浴びている VQE であるが、実験的な実現は数 qubit 程度を用いたごく小規模のもの (例えば [1] など) にとどまっている。数値計算による評価も [2] などで行われているものの、未だ VQE がどの程度の能力を持っているのか明確ではない。

2. 目的

上記の背景を踏まえ、本プロジェクトでは、VQE を中心に変分量子アルゴリズムの性能評価を行い、NISQ デバイスの応用可能性を明らかにすることを試みる。性能評価は古典コンピュータ上に VQE のシミュレータを作成して行う。シミュレータ構築と並行して、従来アルゴリズムでは難しいとされる分子種も調べ、性能評価にはそれらの分子を使うこととする。また、性能評価結果を踏まえた VQE アルゴリズムの改良開発も行う。最終的には、本プロジェクトによって得られた VQE の応用可能性に関する知見が、今後の量子コンピュータのアプリケーション開発に対して、さらに具体的な方向性を与えることが目標である。

3. ソフトウェア開発内容

まず、実機のノイズをも模倣できるような VQE のシミュレータを開発した。様々な量子回路・最適化方法などをオプションとして入力できるようになっている。表 1 としてそのシミュレータの機能一覧を示す。

表 1 作成したシミュレータの概要

機能	利用可能なオプション
エラー補償	線形外挿法・指数関数外挿法
サンプリングによる期待値推定	有限のサンプリング数による期待値推定 (パウリ演算子の同時測定・個別測定)・厳密な期待値推定
最適化	scipy に実装されている一連の最適化手法・勾配降下法・虚時間発展法・AdaDelta・AdaGrad・RMSprop・MomentumGD・SPSA 法・parameter-shift-rule による解析的な勾配推定
量子回路	hardware-efficient 回路 (3 種)[1]・粒子数保存回路[3]・UCCSD・UCCD・decomposed-UCCD
ノイズ	1 量子ビット depolarizing noise・2 量子ビット depolarizing noise

※ UCC: unitary-coupled-cluster

続いて開発した上記シミュレータを用いて VQE の性能評価を行った。まずシミュレータのテストを兼ねた 1 量子ビットの単純な例から始め、続いて一番単純な分子である水素分子、最後に従来手法でも難しい系である水素原子鎖へと、少しずつ問題の難しさを上げていながら評価した。ここではその評価結果の例として、直線上に等間隔に並べた H₄ 分子の基底状態を出力するタスクを挙げ、結果を図 1 に示した。この際、必要とするハードウェアの性能を同程度にするため、粒子数保存回路と hardware-efficient 回路に含まれる 2 量子ビットゲートの数をおおよそ同じにしている。

図 1 の結果は、粒子数保存回路のようにその物理系の対称性を考慮したものの性能が良いことを示唆している。また、同じようなグラフを実際の NISQ デバイスを用いて出すための時間についても試算を行い、図 1(a)のグラフを得るには 100 時間程度 NISQ デバイスを使い続けなければならないという結果を得た。使用した系の厳密解が、古典計算機でも数秒程度で厳密解が得られる系であることを鑑みると、悲観的な結果ではあるが、現状の NISQ 向けアルゴリズムがこの程度の性能であるという知見が得られた。なお、本プロジェクトでは表 1 に記載した様々な最適化方法についてもその性能を調査しており、本プロジェクトで調査した範囲では、勾配降下法が最も安定した性能を示したため、上記性能評価・試算は勾配降下法を用いた結果である。

また、新規手法として、VQE によって求めたエネルギーの微分値を解析的に求めるアルゴリズムを開発した。例えば原子の配置を変化させたとき、どのようにエネルギーが変化するかがわかれば、分子構造の決定などの応用へとつながる。このようにエネルギーの微分値は、物理系の様々な物性を計算するために必須の量であるが、VQE で求めたエネルギーに対して微分値を求める方法はこれまで特に提案されておらず、もし微分値を求めた

いならば精度の低い数値微分に頼らざるを得なかった。そこで本プロジェクトでは、エネルギーの微分値を解析的に求める、すなわち微分値を精度良く評価できる手法を開発し、上記 VQE シミュレータにつなげる形で実装した。本手法は原著論文の形で公開している [4]。

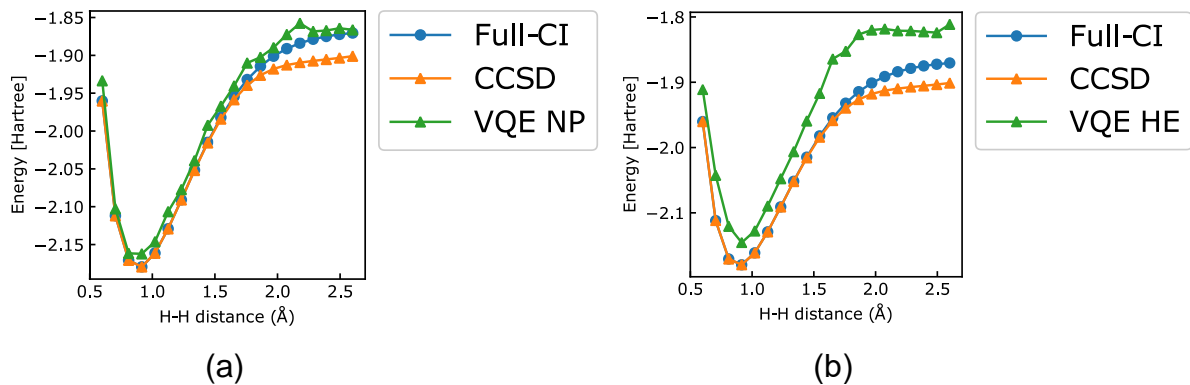


図 1 直線状 H₄ 分子を用いた性能評価。緑線が VQE のシミュレーションによって得られた結果を示す。(a) 粒子数保存回路を用いた場合。(b) hardware-efficient 回路を用いた場合

4. 新規性・優位性

本プロジェクトでは、python インターフェイスを持つ高速量子回路シミュレータ Qulacs を利用して VQE シミュレータを構成したため、例えば他のオープンソースライブラリである Qiskit や Cirq などの実装に比べて高速に動作する。これにより VQE の迅速な性能評価が可能となり、前節のような評価結果を得ることができた。また、性能評価で得られた量子回路や最適化手法に関する知見はそれ自身新規である。

エネルギーの微分値を解析的に求める手法は、数値微分よりも精度の良い微分値を求められるという点で、従来数値微分を使うほかなかった状況を改善したと考えている。具体的には、数値微分の場合、微分を求めるためにあるパラメータ（例えば原子間距離）を微小に変化させた点でエネルギーを求め、もとの点との差分を取るという操作をするが、この際求めた微分値にはステップサイズに依存した誤差が生じてしまう。しかし本手法はそもそも微小に変化させるという操作をしないため、その効果をなくすことが可能である。また、アルゴリズムそれ自身も新規なものとなっている。

5. 期待されるユーザー価値と社会へのインパクト

シミュレータに関してはその高速性を活かし、今後も VQE に関する新たな手法が提案された際には、それを取り込むことによって、それまでの手法との比較を迅速に行える。いまだその可能性に不透明感が否めない VQE のような手法においては、このようなシミュレータが整備されていることが重要であると考えられる。

また、本プロジェクトで開発したエネルギー微分手法は「解析的な微分値を求められる」という特徴がある。これによりエネルギー微分値の精度を飛躍的に向上可能である。VQE

が実用化した際には、それを用いて様々な物理量の計算が行われると考えられるが、本手法はそのような世界において、計算時間を大幅に短縮するというユーザー価値を持つだろうと考えている。

6. 氏名(所属)

御手洗 光祐 (大阪大学基礎工学研究科博士後期課程)

(参考)文献・関連 URL

- [1] A. Kandala et al., *Nature* **549**, 242–246 (2017).
- [2] D. Wecker, et al., *Physical Review A* **92**, 042303 (2015).
- [3] B. T. Gard et al., *npj Quantum Information* **6**, 10 (2020).
- [4] K. Mitarai, et al., *Physical Review Research*, **2**, 013129 (2020)