

NISQデバイス向けの最適VQE設計アルゴリズムの開発

— 測定の最適化による高速な期待値推定 —

福地一真、和田凱渡

【背景・目的】

NISQデバイス上で実行することのできるVQAは将来的に材料設計や計算創薬への応用が期待されている。しかしこうした目的でVQAを用いる場合、複数の項からなる演算子の期待値を推定するプロセスがボトルネックである。本プロジェクトは期待値推定プロセスを項数削減(グルーピング)とサンプリング法改善という2つの側面から高速化することを目的としている。

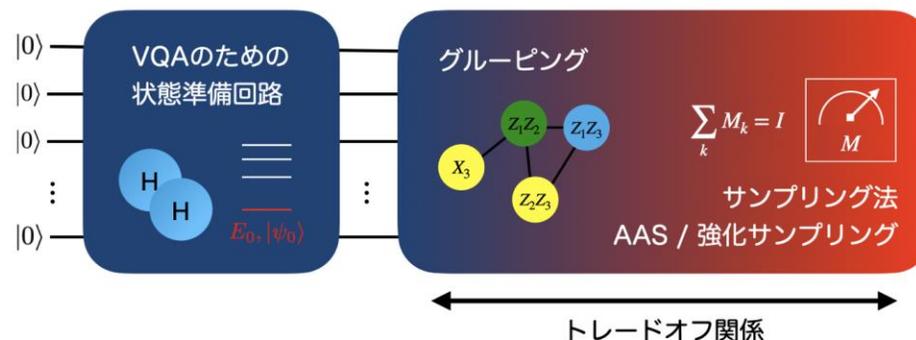
【開発成果】

サンプリング法を改善した我々の新手法 Amplitude Amplified Sampling (AAS) にグルーピングを組み合わせた手法で水素分子の基底エネルギーを推定したとき、我々の手法は標準的手法に比べて大幅な測定回数の削減を実現した。さらに実機の性能が上がるにつれ我々の手法の推定力が向上することも確認できた。

【社会へのインパクト】

我々の手法を用いることでVQAを用いて量子計算を行うユーザーがより効率的に計算結果を得ることが出来るため、VQAの応用先である計算創薬等の開発期間を短縮することが可能になると予想される。加えて我々はこの新たな手法が将来的に計算時間をさらに短縮できることも確認済みであり、この手法が量子計算を必要とするユーザーにとって、今後長期間にわたって必要不可欠なものになると確信している。

—— プロジェクト概要 ——



—— パフォーマンス ——

