

# NISQ デバイス向けの最適 VQE 設計アルゴリズムの開発 —測定最適化による高速な期待値推定—

## 1. 背景

現在使用可能な量子コンピュータは NISQ デバイス(Noisy Intermediate-Scale Quantum device)と呼ばれる誤り訂正機能の無い中規模量子コンピュータである。この NISQ デバイスには計算エラーや qubit 数などの制約があるため、大きなサイズの問題を扱うことはできない。そこで現在は NISQ デバイスが優位性を出せる部分のみを担当し、残りの部分を古典コンピュータで補う形式のアルゴリズム：Variational Quantum Algorithm (VQA)が提案されている。このアルゴリズムの研究は幅広い分野で進められており、将来的に計算創薬・機能的な物質の設計・組み合わせ最適化問題などの社会的に価値のある問題への応用が期待されている。

しかし、VQA には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含まれており、この部分が現実の量子デバイスを用いたときにボトルネックとなることが知られている。具体的に Variational Quantum Eigensolver (VQE)というアルゴリズムを例にとってみると、VQE で必要になるハミルトニアン $H$ の期待値を一般的に用いられるサンプリング手法(以下、標準サンプリングと呼ぶ)に基づいて精度良く推定するためには数億以上の測定を必要とする場合も少なくない。つまり、古典コンピュータに対して量子的な優位性を持つ VQA が現れたとしても、実際に NISQ デバイス実機を用いたときに効率的に期待値推定ができなければ元のアルゴリズムの優位性を打ち消してしまう可能性がある。したがって、いかに効率的に演算子の期待値を推定するか、という問題は量子計算を実用化する上で避けては通れないものである。

## 2. 目的

本プロジェクトでは、NISQ デバイスの持つ固有のエラー率が与えられたとき、期待値推定を効率的に行うための最適な量子回路を設計するアルゴリズムを開発する。加えて水素分子などのエネルギー期待値を推定するという問題設定において、我々の開発したアルゴリズムの性能を評価する。

## 3. ソフトウェア開発内容

本プロジェクトでは、NISQ デバイスの持つ固有のエラー率が与えられたとき、期待値推定を効率的に行うための最適な量子回路を設計するアルゴリズムを開発し、性能を評価した。ハミルトニアン  $H = \sum_k h_k O_k$  の期待値  $\langle H \rangle$  を推定する VQE を例にとれば、効率的に  $\langle H \rangle$  を推定するためには次の2つのアプローチが考えられる。1つは推定すべき演算子  $O_k$  の数を減らすアプローチ、もう一つは各  $\langle O_k \rangle$  を効率よく推定するアプローチである。前者はグルーピング、後者は強化サンプリングと呼ばれており、現在までそれぞれ独立に研究されてきたテクニックである。しかし、ノイズの影響を考慮すると単純にこれら2つのテクニックを組み合わせることはできない。そこで、NISQ デバイスを用いた計算において、それぞれの利点を十分に活かしつつ両者を組

み合わせるために多くの理論的な解析を行った。この解析に基づいて、本プロジェクトでは強化サンプリングとグルーピングを同時に考慮した上で、最適な期待値推定を行うための量子回路設計アルゴリズムを提案した。具体的には、グルーピングを考慮した上での強化サンプリング用量子回路の最適化、及びグルーピングを適用するか否かの判断を推定開始前に行うアルゴリズムである。(図1) 加えて強化サンプリングの推定結果が大きく外れる場合があることを発見し、それを克服した強化サンプリングに代わる新たな手法として Amplitude Amplified Sampling (AAS) を提案した。

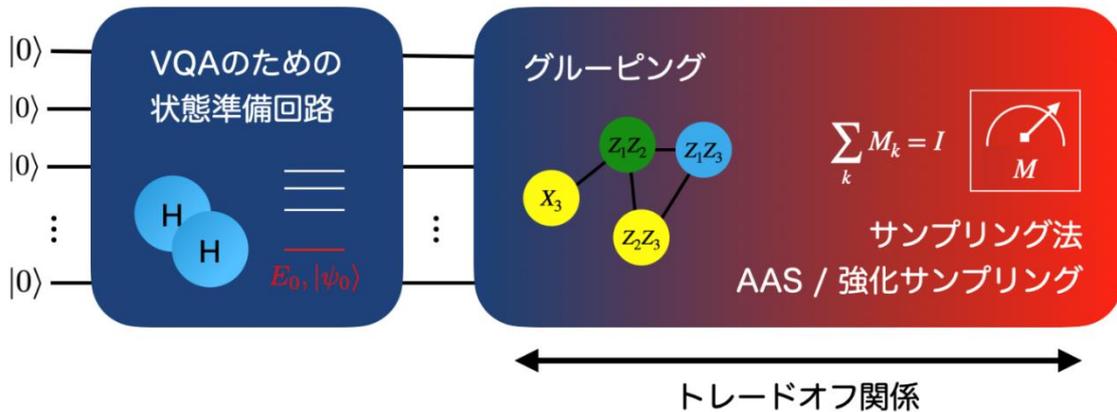


図1 量子回路設計アルゴリズムの概要

AAS ではまず強化サンプリングで使われるものと類似した量子回路を用いてまとまった回数の測定を行い、その時点で推定対象の期待値の推定値を算出する。ここでAAS は1回の測定ごとに量子回路を調整する必要がなく、量子コンピュータと古典コンピュータが完全に同期していなくとも有効な手法であることに注意されたい。また、推定値の計算は数理統計学でよく知られた最尤推定と呼ばれる方法に倣ったものであり、推定量として非常に良い性質(強化サンプリングのように外れた推定をしないなどの漸近的な性質)を持つことも確認済みである。得られた推定値に基づいて次なる測定のために最適な量子回路のパラメータを決定し、再度測定を行う。この手続きを繰り返すことで期待値の推定能力を増加させながら期待値推定を行う手法がAASである。(図2) 加えて、このAASはグルーピングと組み合わせると、より強力な期待値推定アルゴリズムとなる。

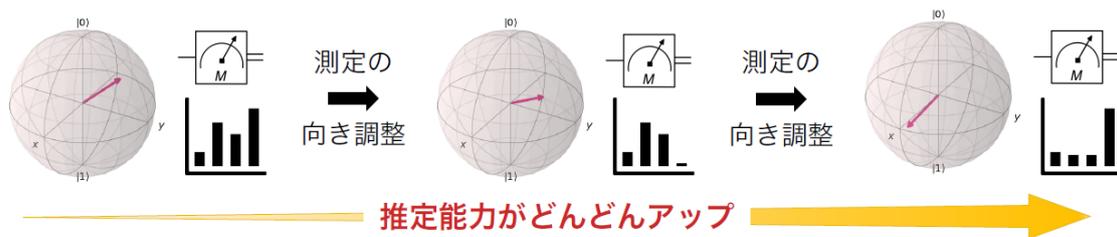
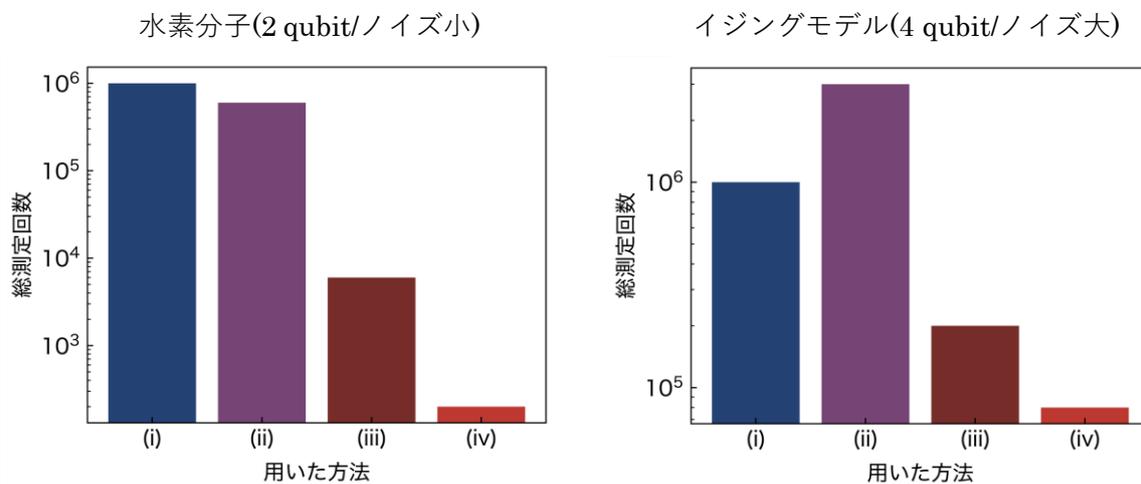


図2 AASの概要

#### 4. 新規性・優位性

VQE を効率化する手法に関する研究は多くなされているが、その中でもハミルトニアン の項数とサンプリング回数をともに減らすという意味で、2重の効率化を図るとい う試みは本プロジェクトが初めてである。また、強化サンプリングに代わる測定手 法 AAS は我々がーから設計した測定手法であり、新規性があると言える。

実際に水素分子とイジングモデルのエネルギー期待値をある精度で推定する場合 に必要な測定回数を図 3 に示す。我々の手法は標準サンプリングと比較して、ノイズ の影響を受けにくい水素分子の場合 3000 倍、水素分子よりも少しノイズの影響を受 けやすいイジングモデルの場合でも 12.5 倍の加速を達成した。特に、グルーピング による測定回数削減の効果よりも AAS による測定回数削減効果が支配的であること に注意されたい。

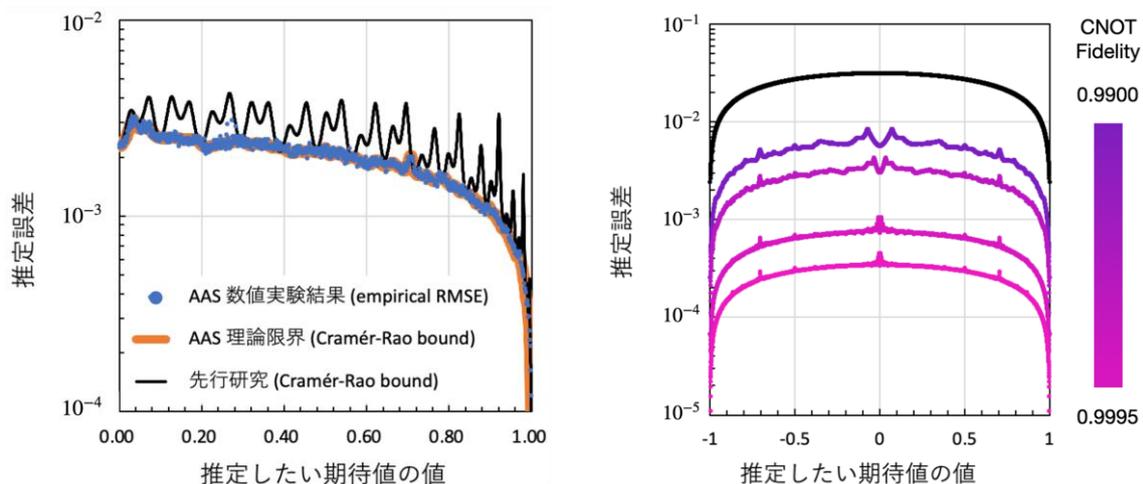


(i)標準サンプリング (ii)標準サンプリング+グルーピング (iii)AAS (iv)AAS+グルーピング

図 3 水素分子とイジングモデルのエネルギー期待値推定における必要な測定回数  
状態準備回路に CNOT ゲートが水素分子で 3 個、イジングモデルで 14 個含まれているとし、1 つの CNOT ゲートは 0.5%のエラーを持つとした。また、水素分子では推定誤差 0.0005 の精度、イジングモデルでは推定誤差 0.01 の精度を達成するのに必要な測定回数をそれぞれ示している。

次に、AAS が持つ期待値推定能力に関して、その安定性と高速性について述べる。図 4 の左図には図 3 の水素分子と同じ実験設定において 1800 回測定を行ったときの AAS の性能を表す。オレンジ線は統計学から理論的に計算できる誤差の下限(Cramér-Rao bound)、青線は実際に AAS を用いた期待値推定のプロセスを数値的にシミュレートした場合のプロット(empirical RMSE)である。また黒線は AAS と同じ統計のモデルに基づいて計算する先行研究であり、AAS のアルゴリズムに存在する測定の最適化を含まない場合の実験結果である。この結果から AAS はあらゆる期待値の値に対して理論的な限界を達成しており、非常に安定的な手法であることが確認できた。また図 4 の右図で CNOT ゲートのフィデリティ(すなわち、NISQ デバイスの性能)の変化に伴う AAS の推定能力の変化を示す。縦軸、横軸、および実験設定は測定回数が

1000 回である点を除いて先ほどと同じで、明るい色のプロットほど高い性能を持つ量子デバイスを想定したものである。特に比較のため、一番上の黒いプロットは標準的な手法のものを記載してある。現状 NISQ デバイスの CNOT ゲートのフィデリティはおよそ 0.995 であるため、図の 5 本のうちの真ん中あたりの性能を出すことができる。さらに、実機の性能が上がるにつれて AAS はより高い性能を発揮できるようになるため、NISQ デバイスを超えたより高性能なデバイスにおいても有効な手法であると期待される。



AAS の期待値推定能力の安定性

NISQ デバイスの性能と AAS の性能の関係

図4 AAS の性能

## 5. 期待されるユーザー価値と社会へのインパクト

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必要不可欠である。そしてこの期待値推定のプロセスは実際の NISQ デバイスを用いた量子計算において非常に多くの時間コストがかかる部分になっている。本プロジェクトで提案する手法は VQA に付随する期待値推定のプロセスを高速化し、上述のような実際的に問題となりうる時間コストを削減することが可能である。これにより、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。加えて我々の手法は NISQ デバイスを超えたより高性能な量子デバイスを用いるとより高い期待値推定能力を発揮できるため、量子デバイスの発展に伴って計算時間をさらに短縮することも可能である。したがって、我々は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渡って必要不可欠なものになると確信している。

## 6. 氏名 (所属)

福地一真 (慶應義塾大学理工学部物理情報工学科)

和田凱渡 (慶應義塾大学理工学部物理情報工学科)