

変分量子固有値ソルバーにおける波動関数補正法の開発 —VQE による電子状態計算の精度向上戦略の構築—

1. 背景

分子の電子状態計算は、量子コンピュータのキラーアプリケーションとして注目を集めている。現在の電子状態計算手法の主流は密度汎関数理論(DFT)や時間依存DFTであるが、これらの手法は強い電子相関を含む系を正しく扱えないことが知られている。強い電子相関をもつ系は触媒や光機能材料の反応において重要な役割を果たし、その解析は反応機構の理解や新規材料の設計において重要となる。

このような系を扱うためには、計算対象の電子状態を複数の電子配置の重ね合わせで表現する手法が必要となる。しかし、この手法では計算対象の大きさに対して考慮すべき電子配置の数が爆発的に増加してしまうため、従来のコンピュータ(以下、古典コンピュータ)では化学的に興味深い系の計算は困難であった。これに対して、量子コンピュータでは量子ビットの重ね合わせ状態を用いることで、複数の電子配置の重ね合わせを一度に表現できるという特徴を持つ。これにより、系の大きさに対する計算コストの爆発的増加を抑えられることが期待されている。

量子コンピュータを用いて電子状態計算を行う手法の一つに、変分量子固有値ソルバー(variational quantum eigensolver, VQE)がある。VQEでは、パラメタ化された量子回路(アンザッツ)に対して、量子コンピュータによるエネルギー計算と古典コンピュータ(オプティマイザ)によるパラメタ更新を交互に繰り返すことでエネルギーを最小化する。量子化学の変分原理によれば、エネルギーが最小となる状態が真の基底状態(最安定状態)であるため、これによって基底状態を求めることができる。

しかし、実際にVQE計算を実行すると様々な問題に直面する。例えば、アンザッツ構造が適切でないと真の解に辿り着けないほか、量子コンピュータ上のエネルギー計算にかかわるエラーや、古典コンピュータによるパラメタ更新の失敗も起こりうる。その結果、現在報告されている量子コンピュータ実機を用いた計算例では、化学的な議論に必要なエネルギー精度(1 kcal/mol = 1.6 mHartree)は達成されていない。

2. 目的

以上の背景から、本プロジェクトでは、VQE計算におけるアンザッツのパラメタを精度良く求めることで計算精度を向上させることを目的とし、そのために、VQE計算条件を決定するための計算戦略を構築するというアプローチをとった。これは、最終的なVQE結果に含まれる誤差には様々な要因の影響があり、計算条件のどこを改善すれば精度が向上するのかが必ずしも明らかではないためである。

3. ソフトウェア開発内容

本プロジェクトでは、様々な系のVQE計算を通して現れた課題を整理することで、「statevector 計算戦略」(図 1)および「ノイズ・エラー対処戦略」(図 2)を構築した。

statevector 計算戦略

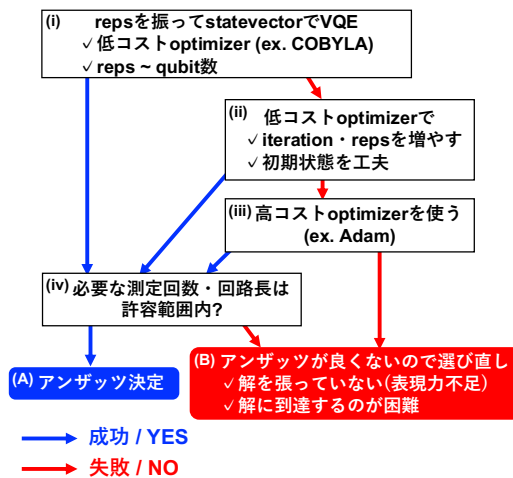


図 1 statevector 計算戦略

statevector 計算戦略は、ノイズやエラーのない理想的な環境(statevector シミュレータ)において VQE 計算を成功させるものである。(i) から始めて枠内の指示に従って VQE 計算を行いながら成功・失敗を辿って下まで降りてくることで、「(A) アンザッツ決定」または「(B) アンザッツが良くないので選び直し」のいずれかに分類される。(A)では、(statevector シミュレータでは)VQE 計算が成功するアンザッツと計算条件が見つかったため、次の「ノイズ・エラー対処戦略」に進むことができる。(B)では、ノイズ・エラーのない statevector シミュレータでさえ真の解に到達できないため、アンザッツそのものを見直す必要がある。

ノイズ・エラー対処戦略

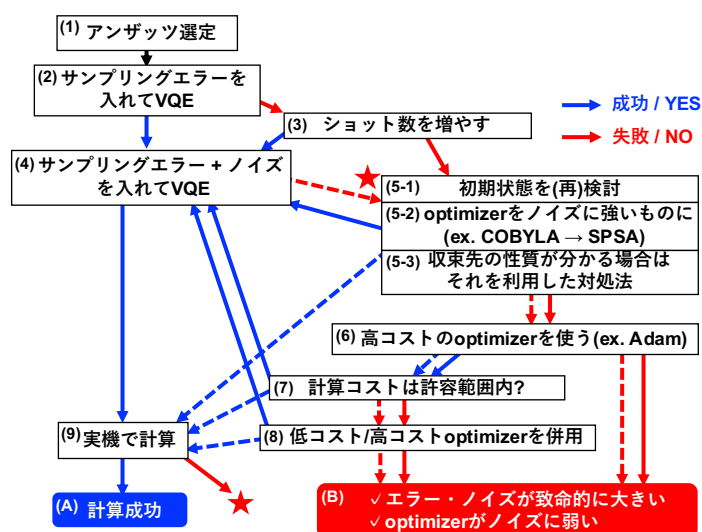


図 2 ノイズ・エラー対処戦略

ノイズ・エラー対処戦略は、(1) から始めて先程と同様に降りてくることで、「(A) 計算成功」または「(B) エラー・ノイズが致命的に大きい/オプティマイザがノイズに弱い」のいずれかに分類される。なお、図中で複数の矢印が出入りしている枠は、実線どうし・点線どうしで進むものとする。(A)ではノイズ・エラーの存在する実機での計算が成功(誤差 1 kcal/mol 未満)し、(B)では現在検討している条件では VQE 計算で所定の精度を達成するのは困難であると判断する。(B)に分類されてしまった場合は、アンザッツの構造を見直して、再度 statevector 計算戦略によるアンザッツ選定からやり直す必要がある。

戦略の適用例

戦略の構築に際しては、2 qubit ~ 12 qubit の系を扱ったが、ここでは各戦略の適用例として 2 qubit と 6 qubit の例を一つずつ紹介する。

・エチレン(パリティマッピング、2 qubit) + Real Amplitudes アンザッツ

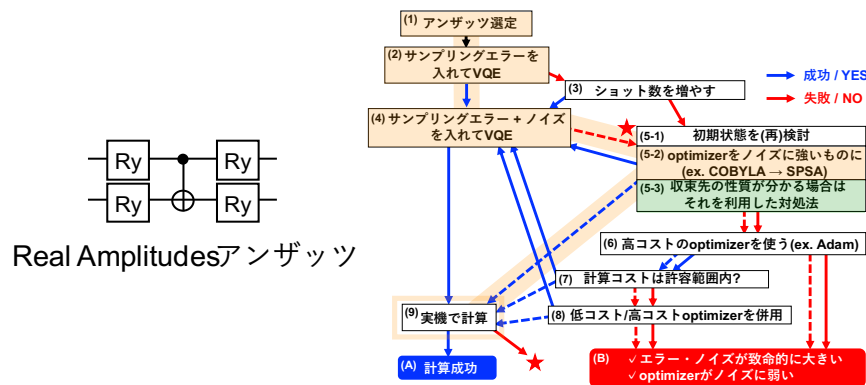


図 3 使用したアンザッツ(左)と計算戦略を辿った経過(右)

この系では Real Amplitudes と呼ばれるアンザッツを用いた(図 3, statevector シミュレータによる計算はすでに成功)。戦略に従って、(2)サンプリングエラーを入れて VQE に成功し、(3)ノイズを加えて VQE を行ったところ、誤差が大きく計算に失敗した。そこで戦略に従って(5-2)ノイズに強いオプティマイザに変更(COBYLA → SPSA)したところ、結果が大幅に改善した(図 4(a), 縦軸は真の解との重なりで、1 に近いほど解の精度が良い。平均的な性能を見るために同条件で行った 30 回の結果をプロットした)。しかし、依然として一部の計算では誤差が見られ、それらを調べるとスピン 2 乗の期待値 $\langle \hat{S}^2 \rangle$ が 0.5 – 1.0 程度の値であったため、この誤差は $\langle \hat{S}^2 \rangle$ が大きいことで特徴づけられる(真の解では $\langle \hat{S}^2 \rangle = 0$)。そこで戦略(5-3)を適用し、VQE 計算で最小化する対象を「エネルギー $\langle \hat{H} \rangle$ とスピン 2 乗 $\langle \hat{S}^2 \rangle$ の和」とした。その結果、オプティマイザにかかわらず精度が大幅に改善し(図 4(b))、ノイズを考慮した計算でも十分な精度が得られる条件が見つかった。戦略に従えば、次に行うべきは(9)実機計算である。

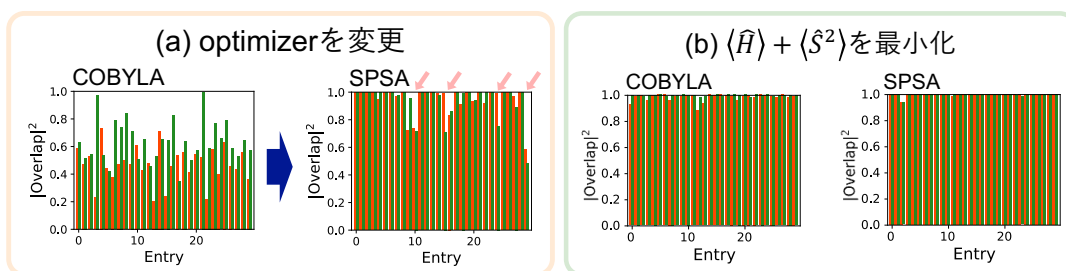


図4 ノイズ・エラー対処戦略による精度の改善 (赤: 8192 shots, 緑: 20000 shots)

・ブタジエン(パリティマッピング、6 qubit) + Real Amplitudes アンザッツ

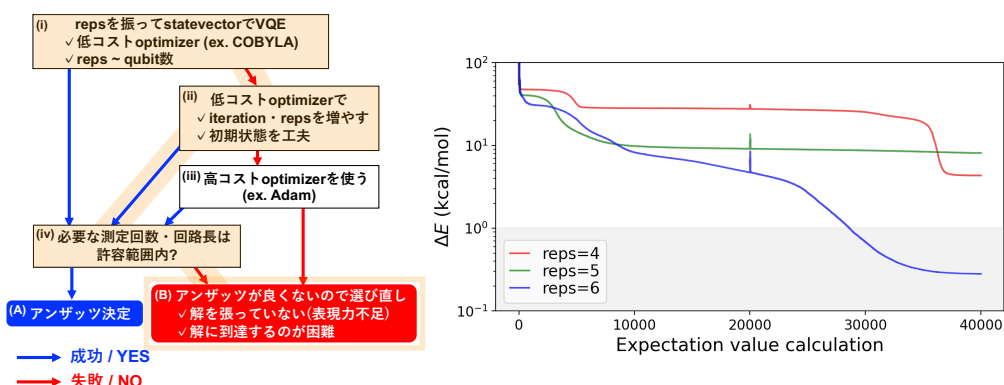


図5 statevector 計算戦略を辿った経過(左)と VQE 結果(右)

次に、同様のアンザッツで6 qubit の系を扱った場合を見てみる。この場合は、先程とは違って statevector 計算戦略を図5(左)のように辿り、計算に失敗した。VQE 結果を見ると、VQE 計算の収束までに必要な繰り返し回数が数万回と非常に大きくなってしまっている(図5(右))。statevector 計算戦略により、この場合はアンザッツの再検討が必要と判断できる。

4. 新規性・優位性

本プロジェクトで開発した計算戦略は、VQE 計算の誤差に対して計算条件のどの部分を見直せば良いかという指針を与えるものである。このような指針は、特に量子コンピュータによる計算を新規に始めようとする場合には非常に有用である一方で、計算の失敗例に関する知見は研究成果といった形では共有されづらい傾向にある。この点に取り組んだのが本プロジェクトであり、これにより量子コンピュータを量子化学計算に利用する際の困難が軽減されることが期待される。

5. 期待されるユーザー価値と社会へのインパクト

本プロジェクトの成果である計算戦略は、古典コンピュータでの量子化学計算を経験したユーザーが量子コンピュータに参入する際の助けになるものである。例えば、量子コンピューティング技術によく慣れ親しんでいない場合、量子コンピュー

タを量子化学計算に応用するメリットは把握しているものの、実際に量子コンピュータ(やそのシミュレータ)を使った際に現れる誤差については闇雲に対処するしかない、という状況に陥ってしまいかねない。この状況を回避するのが本プロジェクトの計算戦略である。

このように、本プロジェクトの成果は量子化学計算への量子コンピュータの利用を促進するものである。これは、将来的な量子コンピュータを用いた量子化学計算による反応解析や新規材料開発に役立つと考えられる。

6. 氏名 (所属)

後町 慈生 (慶應義塾大学 大学院理工学研究科)

(参考) 関連 URL

本プロジェクトに関連するコード : https://github.com/hatanaka-lab/IPA_mitouTG