変分固有値ソルバーにおける量子回路と古典最適化手法の検討

Variational Circuits and Classical Subroutine in Variational Quantum Eigensolver

東京農工大 °津嘉山大輔、三木司、沖田涼、白樫淳一

Tokyo University of Agriculture & Technology

°D. Tsukayama, T. Miki, R. Okita, and J. Shirakashi

E-mail: s184391u@st.go.tuat.ac.jp

Google や IBM 等が開発を進める Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ) デバイスは、完全な誤り訂正機能を有する汎用型量子計算機へのマイルストーンとして大きく注目されている。量子・古典ハイブリッドアルゴリズムは、NISQ でも実現可能な規模の量子回路によるパラメータ付き量子状態の生成と、古典計算機によるパラメータ最適化を組み合せた手法である。中でも、変分固有値ソルバー(Variational Quantum Eigensolver: VQE)は量子化学計算の分野で量子超越が期待されているアルゴリズムである[1]。しかし、量子回路の形状次第ではパラメータの探索空間において勾配が消失することがあり、古典計算機が最適なパラメータを決定できない問題がしばしば発生する[2]。一方、量子ビット数 n に対し $O(\log n)$の深さを有する特定の量子回路においては、勾配消失問題を回避できることが最近明らかとなった[3]。これまで我々は、$O(\log n)$以下の深さを有する量子回路を VQE に適用した際に、組合せ最適化問題の解探索を効率よく実行できることを示してきた[4]。今回は、パラメータ空間の効率的な探索による演算精度向上のため、VQE における量子回路の形状とその最適化に用いる古典計算機側のサブルーチンについて詳細に検討する。

本研究では IBM Quantum Experience [5]から利用可能な 15 量子ビット計算機 ibmq_16_melbourne を使用する。以下に VQE の手順を示す。はじめに、$\boldsymbol{\theta}$ でパラメータ化された量子状態$|\psi(\boldsymbol{\theta})\rangle$を変分回路$U(\boldsymbol{\theta})$により生成し、ハミルトニアン H に対する$|\psi(\boldsymbol{\theta})\rangle$の期待値$\langle\psi(\boldsymbol{\theta})|H|\psi(\boldsymbol{\theta})\rangle$を測定する。次に、古典計算機を用いて期待値の勾配を計算し、期待値が減少するような $\boldsymbol{\theta}$ を探索する。表 1 に、VQE をシミュレーション、ibmq_16_melbourne それぞれで 100 回行った場合の正答率 Fraction of Instance および、量子回路の実行回数 Function Evaluations の平均値を示す。問題は 5 ノード完全グラフの Max-Cut 問題とし、変分回路には Y ゲート 1 層からなる回路を用いた。また、パラメータの最適化手法には勾配ベクトルとヘシアンの計算を必要としない COBYLA 法と Powell 法、および変分回路による勾配ベクトルの近似計算[6]を利用した BFGS 法を用いて比較した。この結果、BFGS 法を使用した際に最も高い確率で最適解を得ることができた。一方、COBYLA 法は他のアルゴリズムに比べ正答率は低下するものの、量子回路の実行回数を低減できたことから、VQE プロセス全体の高速化が達成できた。以上より、深さを $O(\log n)$以下とした変分回路とパラメータ最適化手法の適切な組合せにより、VQE の演算特性を向上できる可能性が示唆された。

TABLE I. Fraction of instance and averaged value of function evaluations in 100 trials using VQE with BFGS, COBYLA, and Powell method. Each procedure is executed in both simulation and ibmq_16_melbourne.

Metrics	Simulation			ibmq_16_melbourne [5]		
	BFGS	COBYLA	Powell	BFGS	COBYLA	Powell
Fraction of Instance	**0.92**	0.73	0.84	**0.87**	0.64	0.82
Function Evaluations	315.5	**78.8**	287.8	323.0	**70.0**	312.9

References

[1] A. Peruzzo, J. R. McClean, P. Shadbolt, M.H. Yung, X.Q. Zhou, P. J. Love, A. Aspuru-Guzik, and J. L. O'Brien, Nat. Commun. 5 (2014) 4213.

[2] J. R. McClean, S. Boixo, V. N. Smelyanskiy, R. Babbush, and H. Naven, Nat. Commun. 9 (2018) 4812.

[3] M. Cerezo, A. Sone, T. Volkoff, L. Cincio, and P. J. Coles, Nat. Commun. 12 (2021) 1791.

[4] 三木司、島田萌絵、沖田涼、白樫淳一、電子情報通信学会技術研究報告, vol. 121, no. 44 (2021) pp. 31-34.

[5] IBM Quantum Experience, "https://quantum-computing.ibm.com/" (2021).

[6] K. Mitarai, M. Negoro, M. Kitagawa, and K. Fujii, Phys. Rev. A 98 (2018) 032309.

© 2021年 応用物理学会