

# 量子計算機での勾配推定を用いた変分量子固有値法における 変分パラメータ最適化

## Estimating the Gradient on Quantum Processor Unit for Variational Quantum Eigensolver

東京農工大<sup>1</sup>、東京大<sup>2</sup>

○津嘉山大輔<sup>1</sup>、三木司<sup>1</sup>、沖田涼<sup>1</sup>、白樫淳一<sup>1</sup>、今井浩<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Tokyo University of Agriculture & Technology, <sup>2</sup>The University of Tokyo

○D. Tsukayama<sup>1</sup>, T. Miki<sup>1</sup>, R. Okita<sup>1</sup>, J. Shirakashi<sup>1</sup>, and H. Imai<sup>2</sup>

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

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わせた手法である。中でも、変分量子固有値法 (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手法である[1]。前回の報告では、勾配を用いた最適化手法での VQE のパラメータ最適化において、勾配不要な最適化手法と比較し、より大きな問題サイズでの演算精度の向上を確認した[2]。今回は、古典計算機 (CPU) 上で近似的に勾配の算出を行う場合と、量子プロセッサ (QPU) を活用したパラメータシフト法[3]による勾配算出法を比較し、VQE の演算精度への影響について検討した。

本研究では IBM Quantum[4]から利用可能な QPU を使用する。図 1 に VQE によるパラメータシフト法を用いた際の変分パラメータ最適化手順を示す。QPU では、 $\theta$  でパラメータ化された量子状態  $|\psi(\theta)\rangle$  を変分回路  $U(\theta)$  により生成し、ハミルトニアン  $H$  に対する  $|\psi(\theta)\rangle$  の期待値  $\langle\psi(\theta)|H|\psi(\theta)\rangle$  を測定する。パラメータシフト法では、 $i$  番目の Qubit における変分パラメータ  $\theta_i$  を  $+\pi/2$ 、 $-\pi/2$  それぞれ変化させるプロセスを全 Qubit に対して行い、期待値を測定することで  $\theta_i$  の偏微分が得られる。次に、CPU で期待値の勾配を計算し、期待値が減少する方向に  $\theta$  を更新する。期待値の測定と  $\theta$  の更新を繰り返し、基底状態を探索する。パラメータの最適化手法には BFGS 法を用いた。Y ゲート 1 層からなる変分回路を有する VQE[5]を、量子計算向けの SDK である Qiskit から利用可能な Qasm Simulator に実装し、5 ノード完全グラフの Max-Cut 問題を 100 問求解した結果、パラメータシフト法を用いた場合の平均近似率が 1.06 となり、有限差分法を用いた場合の近似率 1.41 と比較して精度の向上が見られた。以上から、VQE が形成する探索空間でのパラメータ最適化では、変分量子回路を用いた勾配推定が有効であることが示唆された。

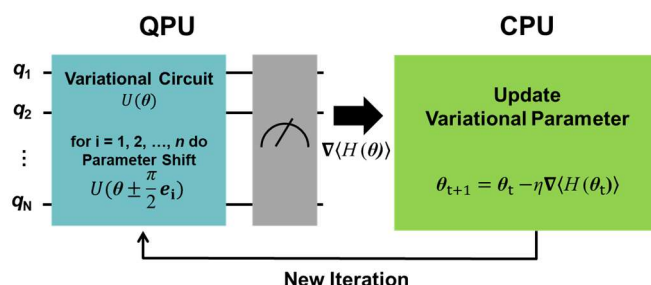


Fig. 1 Parameter optimization framework of VQE by estimating the divergence with parameter shift rule. The partial derivative of each parameter is estimated in QPU. Each parameter is updated by calculating the gradient of the expectation value in CPU.

### 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] 津嘉山大輔、三木司、沖田涼、白樫淳一、第 82 回応用物理学会秋季学術講演会、12p-S101-12 (2021).
- [3] K. Mitarai, M. Negoro, M. Kitagawa, and K. Fujii, Phys. Rev. A 98 (2018) 032309.
- [4] IBM Quantum, "https://quantum-computing.ibm.com/" (2022).
- [5] T. Miki, R. Okita, M. Shimada, and J. Shirakashi, 2021 IEEE International Conference on Manipulation, Manufacturing and Measurement on the Nanoscale (3M-NANO) (2021) 214.