

Frame Superposition Cluster (FSC) を用いた 量子アルゴリズムVQE法における非対角項の導出とその評価 Estimation of non-diagonal terms derived by VQE method using Frame Superposition Cluster (FSC)

QuantScape¹, 凸版印刷DI本部² 若浦 光^{1(CE)}, ○友野 孝夫²
QuantScape¹, DI Div. Toppan Printing², Hikaru Wakaura¹, °Takao Tomono²
E-mail: takao.tomono@ieee.org

光量子暗号の研究は量子アルゴリズムの理論から実験が行われた。それ故に、量子アルゴリズムの研究は量子物理（量子情報）の研究に重要である。

さて、2016年にIBMによって5量子ビット量子計算機がクラウド利用できるようになって研究が発展してきた。変分量子アルゴリズムは2011年にAlan Aspuru-Guzik教授によってその原理が提案され、多くの研究グループによって研究されてきたが、それ以降は量子化学計算を始め人工知能、創薬などにも応用され始めた。昨年後半にIBMが2023年までに1000量子ビット量子計算機をリリースすると発表[1]を行い、この分野の研究は今後ますます盛んになるであろう。

Variational Quantum Eigensolver (VQE) 法[2]は、変分量子化学計算アルゴリズムの一つで、量子化学における変分法を量子計算機と古典計算機の両方を用いて解く方法である。このアルゴリズムは様々なグループによって研究され、今では様々な発展型が提案されている。このアルゴリズムは第二量子化されたハミルトニアンがパウリ演算子で表せることを利用して、エネルギー固有値を含んだ評価関数を量子計算機で解き、変数の最適化は古典計算機で実施するアルゴリズムである。その中で、Subspace-Search VQE[3]は本来計算できないある状態でハミルトニアンを挟んだ非対角項を計算する方法である。これは複数の状態を共通の変数とクラスターで同時に最適化するので、2状態以上の重ね合わせを容易に作れるメリットがある。

非対角項は、

$$\langle \Phi_j | H | \Phi_k \rangle = a + ib \quad \text{式(1)}$$

$$a = 1/\sqrt{2}(\langle \Phi_j | + \langle \Phi_k |)H(|\Phi_j\rangle + |\Phi_k\rangle)1/\sqrt{2} - 1/2(\langle \Phi_j | H | \Phi_j \rangle + \langle \Phi_k | H | \Phi_k \rangle)$$

$$b = 1/\sqrt{2}(\langle \Phi_j | + i \langle \Phi_k |)H(|\Phi_j\rangle + i|\Phi_k\rangle)1/\sqrt{2} - 1/2(\langle \Phi_j | H | \Phi_j \rangle + \langle \Phi_k | H | \Phi_k \rangle)$$

と表されるのでSSVQEは量子の状態行列のみならず、遷移行列を計算することも可能である。

しかしながら、この手法はエネルギー差を精度良く求めることは可能であるが、エネルギー準位自体を精度良く求めることは難しい。

我々は、新たに、Frame Superpositioned Cluster (FSC)を提案する。これは、任意の二量子状態における量子の重ね合わせを作るクラスターである。これを利用することで、VQE法における遷移行列を効率良く計算することができる。通常のVQE的方法では、位相を束縛条件にすることは出来ないが、式(1)は本来は0のため、これを0にするオペレーターを見つけることで、FSCを作ることが可能である。これを用いて遷移双極子モーメントなどの遷移行列でしか出てこない物理量を計算し、それをSSVQEにおける値などと比較し、評価した結果を発表する。

[1]<https://jp.techcrunch.com/2020/09/24/2020-09-15-ibm-publishes-its-quantum-roadmap-says-it-will-have-a-1000-qubit-machine-in-2023/>

[2] A. Perruzzo and et. al., Nat. Comm. 5.4213(2014)

[3] K. M. Nakanishi, and. et. al., arXiv:1810.09434v2[quant-ph](2018)