

# Calculation of Gibbs partition function with imaginary time evolution on near-term quantum computers

量子古典ハイブリッドアルゴリズムを用いた虚時間発展法による分配関数の計算

松本 佳大<sup>1,2</sup>

東理大理.<sup>1</sup>, 産総研.<sup>2</sup>,

E-mail: matsumo162570@gmail.com

近年のデバイス製造・実装・制御の発達により、誤り耐性のない中規模の量子コンピュータが近い将来実現可能であると言われており、その活用法が現在活発に模索されている。このような計算機は、ノイズあり中規模量子 (NISQ: Noisy Intermediate Scale Quantum) デバイスと呼ばれており、数十~数百量子ビットの量子ビットが含まれ、ゲートエラー率は  $10^{-3}$  程度である [1]。

NISQ コンピュータを活かしたさまざまな変分量子アルゴリズムが提案されており [2, 3]、量子系の時間発展を計算することで、虚時間発展方程式の解をシミュレートすることが可能である [4]。この手法により、量子系の基底状態を、通常の VQE (Variational Quantum Eigensolver) [2, 3] に比べて効率的に得ることができる。さらに、注目する量子ビット系に補助量子ビット系を結合させた全系に対し虚時間発展を行うことで、Gibbs 状態  $\hat{\rho}_{\text{th}}$  を純粋化した TFD (thermofield double states) という熱平衡状態を生成する手法も提案されている [5]。

平衡統計力学においては、分配関数を計算することは、系の熱力学量である自由エネルギーを得るために極めて重要である。ノイズあり中規模量子 (NISQ) デバイスを用いて分配関数を計算する方法が知られているが、Gibbs 状態のコピーを大量に用意して、外挿法による計算を実行する必要があるため、使用する量子ビットの数が増大してしまうという難点があった [6, 7]。

そこで本研究では、NISQ デバイスを用いた分配関数計算のより効率的な方法を提案する [8]。本手法では、変分量子虚時間発展により Gibbs 状態を準備して、温度の異なる Gibbs 状態間のオーバーラップを NISQ デバイスで求めることで、分配関数および、自由エネルギーを求める。この手法では  $N$  量子ビットの系の分配関数を求めるのに  $2N$  量子ビットを利用すれば良い。これは従来手法よりも必要な量子ビット数が少なくすむ。性能評価のために Heisenberg 模型に関して数値計算を行い、実際に高い精度で自由エネルギーを再現した。

## 参考文献

- [1] S. Endo, Z. Cai, S. C. Benjamin, and X. Yuan, *Journal of the Physical Society of Japan* **90**, 032001 (2021).
- [2] A. Peruzzo *et al.*, *Nature communications* **5**, 1 (2014).
- [3] A. Kandala *et al.*, *Nature* **549**, 242 (2017).
- [4] S. McArdle *et al.*, *npj Quantum Information* **5**, 1 (2019).
- [5] X. Yuan, S. Endo, Q. Zhao, Y. Li, and S. C. Benjamin, *Quantum* **3**, 191 (2019).
- [6] J. Wu and T. H. Hsieh, *Physical review letters* **123**, 220502 (2019).
- [7] S. Johri, D. S. Steiger, and M. Troyer, *Physical Review B* **96**, 195136 (2017).
- [8] K. Matsumoto *et al.*, *Japanese Journal of Applied Physics* **61**, 042002 (2022).