

One-Hot Encoding Ansatz を用いた変分量子固有値法による Au 原子接合作製実験での実験パラメータ最適化

Optimizing Experimental Parameters for Fabrication of Au Atomic Junctions Using Variational Quantum Eigensolver with One-Hot Encoding Ansatz

東京農工大学¹、東京大学²

○金刺拓海¹、津嘉山大輔¹、汪俊誠¹、白樫淳一¹、渋谷哲朗²、今井浩²

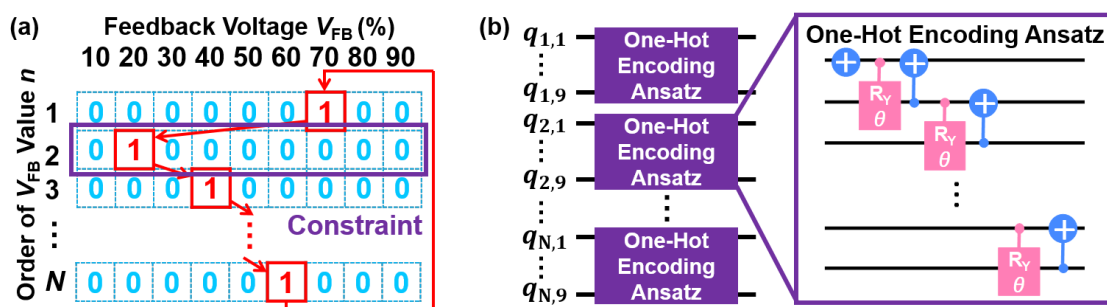
Tokyo University of Agriculture & Technology¹, The University of Tokyo²

○T. Kanazashi¹, D. Tsukayama¹, J. Wang¹, J. Shirakashi¹, T. Shibuya², and H. Imai²

E-mail: s249961t@st.go.tuat.ac.jp

近年、ゲート型量子計算機は量子ビット数の増加やエラー率の改善に伴い、古典計算機に対する優位性が実証されつつある[1]。ゲート型量子計算機の実用的な手法として、変分量子固有値法 (Variational Quantum Eigensolver: VQE)[2]が研究されている。これまで我々は、単一原子の接合構造を有する原子接合の作製手法である Feedback-Controlled Electromigration (FCE)での実験パラメータ探索を組合せ最適化問題として定式化し、イジングマシン[3]および量子アニーラ[4]、ゲート型量子計算機[5]を用いて印加電圧のフィードバック量 V_{FB} (%)に関する実験スケジュールの最適化を行ってきた。図 1(a)に V_{FB} スケジュールを示す。 V_{FB} スケジュールは One-Hot Encoding で表現し、各順序においてバイナリ変数 $\{0, 1\}$ のうち 1 となる V_{FB} を選択する。例えば、図 1(a)は、 V_{FB} が $70\% \rightarrow 20\% \rightarrow 40\% \rightarrow \dots \rightarrow 60\%$ を繰り返すスケジュールを表している。前回の報告では、求解精度向上を目的とし、Conditional Value at Risk を使用した VQE[6]を導入した[5]。この際、Hardware Efficient Ansatz (HEA)を使用し、コスト関数に各順序で 1 つの V_{FB} のみを選択する制約項を用いた。今回は、FCE 法の実験パラメータ探索を効率的に行うために、制約を満たした有効的な解のみを生成する One-Hot Encoding Ansatz (OEA)[7]を導入した。

図 1(b)は、OEA を使用した量子回路である。この量子回路は各順序に対して OEA を配置した構造を有する。OEA は制御回転ゲートと CNOT ゲートを順次接続することで、1 つの量子ビットが $|1\rangle$ 、他の量子ビットは $|0\rangle$ となる量子状態を生成する[7]。これにより、FCE 法の実験パラメータ選択において、各順序につき V_{FB} を 1 つだけ選択する制約が満たされる。本実験では、Qiskit[8]から利用可能な aer_simulator_matrix_product_state 上に VQE を実装した。実験条件として、 V_{FB} は 9 段階、 V_{FB} のスケジュール周期は $N=4$ とした。その結果、HEA を使用した場合の Accuracy は 0.53、OEA を使用した場合の Accuracy は 0.88 となり、HEA を上回った。以上より、OEA を用いることで、実験パラメータ最適化における演算精度の向上が可能であることが示唆された。



Figs. 1 Graphical examples of the V_{FB} scheduling (a) and variational ansatz using one-hot encoding (b).

References

- [1] Y. Kim, et al., Nature 618 (2023) 500.
- [2] A. Peruzzo, et al., Nat. Commun. 5 (2014) 4213.
- [3] S. Sakai, Y. Hirata, M. Ito and J. Shirakashi, Sci. Rep. 9 (2019) 16211.
- [4] Y. Yoneda, M. Shimada, A. Yoshida, and J. Shirakashi, Appl. Phys. Express 16 (2023) 057001.
- [5] 金刺, 津嘉山, 汪, 白樫, 渋谷, 今井: 第 85 回応用物理学学会秋季学術講演会 17a-A22-11 (2024).
- [6] P. K. Barkoutsos, G. Nannicini, A. Robert, I. Tavernelli, and S. Woerner, Quantum 4 (2020) 256.
- [7] O. Shehab, K. Landsman, Y. Nam, D. Zhu, N. M. Linke, M. Keesan, R. C. Pooser, and C. Monroe, Phys. Rev. A 100 (2019) 062319.
- [8] G. Aleksandrowicz, et al., Qiskit: Open-source Framework for Quantum Computing. <https://doi.org/10.5281/zenodo.2562111> (2019).