

変分量子固有値法における測定状態に対するフィルタリングの適用

Variational Quantum Eigensolver with Computational Basis Filter

東京農工大学¹、東京大学²

○齋藤礼音¹、津嘉山大輔¹、金刺拓海¹、白樫淳一¹、渋谷哲朗²、今井浩²

Tokyo University of Agriculture & Technology¹, The University of Tokyo²

○R. Saito¹, D. Tsukayama¹, T. Kanezashi¹, J. Shirakashi¹, T. Shibuya², and H. Imai²

E-mail: s200461x@st.go.tuat.ac.jp

現在のゲート型量子計算機は、Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ) デバイスと呼ばれ、誤り訂正機能を持たず、量子ビット数や量子ゲートの深さに制約がある。NISQ を活用したアルゴリズムの一つは、変分量子固有値法 (Variational Quantum Eigensolver: VQE) である[1]。VQE の演算精度を向上させる手法として、低エネルギー状態の観測確率を高める Filtering Operator を量子回路に適用させる Quantum Variational Filtering (QVF) が提案されている[2]。QVF の特殊な場合において、量子回路の測定結果を利用して Filtering Operator の適用を近似する Filtering VQE が知られている[2]。また、我々は計算量削減を目的として、 N 量子ビット回路の測定結果から観測頻度が高い $\log_2 2^N$ 個の量子状態を抽出するフィルタリング手法を提案した[3]。今回は、本手法を用いた VQE において、フィルタリングにより抽出する状態数が演算精度に与える影響について検討した。

図 1 は、測定状態に対するフィルタリングを適用した VQE の概略図である。量子計算機では、量子回路 $U(\theta)$ を複数回実行し、得られた測定結果から量子状態の確率分布を推定する。古典計算機では、測定結果を観測確率順に並べ替え、フィルタリングによって上位 k 個の測定状態を抽出する。この測定状態を用いてハミルトニアン H の期待値 $\langle H(\theta) \rangle$ を算出し、変分パラメータ θ を最適化する。本手法を、Qiskit[4]から利用可能な aer_simulator_matrix_product_state 上に実装し、VQE による組合せ最適化問題の求解を行った。 $U(\theta)$ は RealAmplitudes (reps = 1) [4] を採用し、変分パラメータは ADAM 法[5]により最適化を行った。4 都市 (16 量子ビット) における巡回セールスマン問題を 5 インスタンス求解した結果、基底エネルギーに対する期待値の比である Accuracy (AC) は、 $k=1$ とした場合に $AC=0.68$ となり、 $k=\log_2 2^{16}=16$ とした場合 ($AC=0.63$) およびフィルタリングを適用しない場合 ($AC=0.65$) を上回った。また、変分パラメータの最適化に要した時間は、32.6 min ($k=1$)、32.7 min ($k=\log_2 2^{16}=16$) となり、フィルタリングを行わない場合 (42.7 min) と比較して短縮された。以上より、測定状態に対するフィルタリングは、適切な状態数を設定することで VQE における演算精度の向上および高速化に寄与することが示唆された。

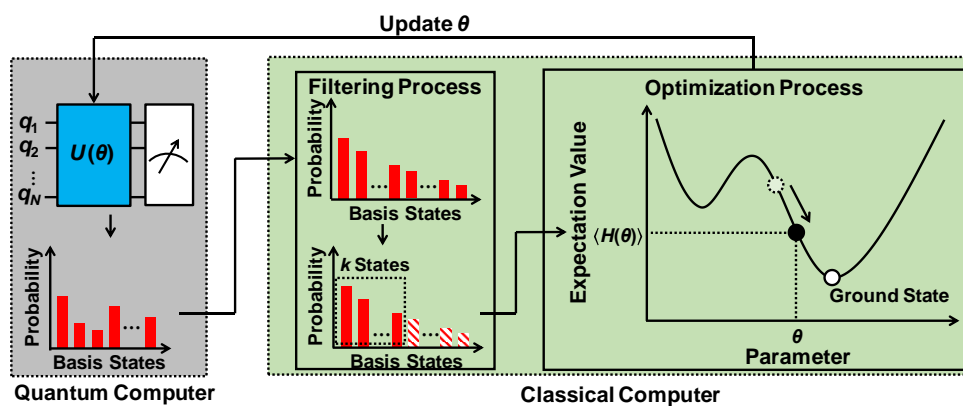


Fig. 1 Schematic diagram of VQE with computational basis filter.

References

- [1] A. Peruzzo, et al., Nat. Commun. 5 (2014) 4213.
- [2] D. Amaro, et al., Quantum Sci. Technol. 7 (2022) 015021.
- [3] 岸, 津嘉山, 李, 汪, 白樫, 今井: 第 84 回応用物理学学会秋季学術講演会 23p-A302-3 (2023).
- [4] G. Aleksandrowicz, et al., Qiskit: Open-source Framework for Quantum Computing (2019).
- [5] D. P. Kingma and J. L. Ba, arXiv:1412.6980v9.