

量子変分アルゴリズムの性能評価とその改良開発

— 量子化学分野での実応用に向けて —

御手洗 光祐 (大阪大学)

本プロジェクトでは、計算途中の雑音はあるが、従来のコンピュータによってその動作をシミュレートすることは難しいゲート型量子コンピュータ、NISQ (Noisy Intermediate Scale Quantum) デバイス向けのアルゴリズムに関して、性能評価や改良開発を行った。

開発したソフトウェアは、NISQデバイス上で物理系の最小エネルギー状態を求めるアルゴリズムである量子変分固有値法 (Variational Quantum Eigensolver, VQE) を、古典コンピュータ上で実行可能なシミュレータである。様々な条件で VQE を実行できるような構成になっており、また高速な量子回路シミュレータ Qulacs を利用したため、他のオープンソースライブラリ (Qiskit・Cirq等) の実装に比べて迅速に性能評価を行うことが可能である。

本プロジェクトではこのシミュレータを用いて VQE の性能評価を行ったことで、将来のアルゴリズム開発のための知見が得られた。右下図にその性能評価結果の例を示した。これは水素原子を 4 つ並べた系の最小エネルギー状態を出力するというタスクを VQE で実行した際の結果 (緑線) であり、従来のCCSD法と呼ばれる近似手法 (橙線)、厳密解(青線)と同時にプロットしている。この系は小さな系であるため古典的に厳密解が求められるが、近似手法が良い値を与えない系である。また、この結果から VQE もある程度良い解を与えうることがわかったため、この結果を実際の NISQ デバイスを用いて得るために必要な時間についても試算したところ、このような小さな系であっても 100 時間程度を要するだろうというものになった。悲観的な試算ではあるが、まだまだ「良い」アルゴリズムを開発する必要があることがわかった。

また、新規手法として、VQEで求めたエネルギーの微分値を解析的に求める手法を開発した。エネルギーの微分値は様々な物性に直結する重要な量であるが、これまで VQE でエネルギーの微分値を計算する手法は単純な数値微分しか存在しなかった。そこで本プロジェクトでは解析的にそれを求める手法を開発し、その精度向上に寄与した。成果は論文として公表済みである。[Phys. Rev. Research, 2, 013129 (2020)]

