

# 低回路深さ同時測定型 VQE の計算コスト検証

森田幹雄<sup>1,a)</sup> 高橋憲彦<sup>1</sup> 栗田知周<sup>1</sup> 大島弘敬<sup>1</sup> 佐藤信太郎<sup>1</sup>

**概要** : NISQ (ノイズの影響を受ける中規模量子デバイス) 上で実行する量子化学計算アルゴリズムとして VQE が注目、また盛んに研究されている。本稿では低回路深さ・同時測定により計算コストを下げた VQE をシミュレータ上で実行し、その評価を行う。また、従来の古典的計算手法による量子化学計算の計算コストと比較し、作成した低回路深さ同時測定 VQE アルゴリズムの量子アドバンテージを検証する。

## Computational Cost Estimation of Low-depth Simultaneous Measurement Type VQE

MIKIO MORITA<sup>†1,a)</sup> NORIHIRO TAKAHASHI<sup>†1</sup> TOMOCHIKA KURITA<sup>†1</sup>  
HIROTA OSHIMA<sup>†1</sup> SHINTARO SATO<sup>†1</sup>

### 1. はじめに

量子コンピュータ上で実行することを想定したアルゴリズムの研究は近年ますます盛り上がりを見せているが、その中でもエラー訂正機能の無い、ノイズの影響を受ける中規模の量子デバイス (NISQ: Noisy Intermediate Scale Quantum device) に関するアルゴリズムが、対象ハードウェアが利用可能になるまでの期間の相対的早さから注目されている。

量子コンピュータのアルゴリズムとしては、素因数分解 (ショアのアルゴリズム) や探索 (グローバのアルゴリズム) などが知られており、量子化学計算もそのうちのひとつである。量子コンピュータ上で走らせる量子化学計算アルゴリズムは大きく2つに分けられ、1つは PEA (Phase Estimation Algorithm)、もう一つは VQE (Variational Quantum Eigensolver) である[1]。このうち NISQ での使用を想定されているものは VQE であり、VQE が古典コンピュータを用いた量子化学計算と比較してどのような位置づけにあるかは、業界の関心を持つところである。

PEA は求める解の精度  $\epsilon$  に対し量子回路の実行・測定を繰り返す回数は  $O(1)$  であるが、量子回路の回路深さが  $O(1/\epsilon)$  になる[2]。そのため、量子化学計算に必要な精度を達成しようとする回路深さが大きくなり、エラー耐性の無い NISQ では正しく計算できないと考えられている。対して VQE は回路深さが精度  $\epsilon$  に対して  $O(1)$  となるため、NISQ 上でもアルゴリズムを上手く組めば実行できる可能性がある。一方で繰り返し実行回数が  $O(1/\epsilon^2)$  となるために、膨大な繰り返し回数が必要になることが知られている[2]。

また、VQE にはその他にも繰り返し回数を増やす要因がある。計算対象となるハミルトニアンはパウリ行列の積の

和によって表され、基本的な手法を取るとこの全ての項に対してそれぞれ期待値を計算し、最後に足し合わせる必要がある。また変分法という特性上、パラメタライズした変数について最適化するプロセスが必要になり、その工程においても繰り返し測定が発生する。

このように VQE は PEA のもつ問題点をクリアしている一方で独特の計算負荷を抱えている。よって、計算コストを抑えるために、より回路深さの浅い量子回路の検討[3]や、測定回数を減らすための同時測定法の検討[4]などが行われている。しかし、具体的にそれらを用いた VQE の計算コストがどのようになるかについてはあまり報告がなされていない。

本稿では、VQE の計算コストについての検討を行うとともに、計算コストを抑えた低回路深さ同時測定型 VQE を作成し、シミュレーションにより評価する。また同時に、古典的な計算手法である CCSD (Coupled Cluster Singles and Doubles) 法と計算コストの比較を行う。

### 2. VQE アルゴリズム

VQE アルゴリズムの全体像を図1に示す。VQE における繰り返し数は以下の3つの項目によって決まると考えることができる。

①射影測定における統計的エラーを軽減するための繰り返し。

これはある条件下の  $\langle H_j \rangle$  の測定における統計的エラーを軽減するために行われるものであり、繰り返し数を  $r$ 、精度を  $\epsilon$  とすると式(1)で表される。

$$r = O(1/\epsilon^2) \quad (1)$$

②測定対象となるパウリ行列 (オブザーバブル) の数。これは第二量子化の式(2)の第2項を Jordan-Wigner 変換

<sup>1</sup> (株)富士通研究所  
FUJITSU LABORATORIES LTD.  
a) morita.mikio@fujitsu.com

や Bravyi-Kitaev 変換により qubit operator に変換することによって生じる項の数で決まる。

$$H = \sum_{pq} h_{pq} a_p^\dagger a_q + \frac{1}{2} \sum_{pqrs} h_{pqrs} a_p^\dagger a_q^\dagger a_r a_s \quad (2)$$

ここで、 $a^\dagger$  は生成演算子、 $a$  は消滅演算子、 $h$  は添え字条件での係数でスカラーである。第 2 項の形から分かるように、4 つの引数から選択される項の和からなるため、変換により生成されるパウリ行列は量子ビット数を  $N$  として  $O(N^4)$  でスケールする。

③ オプティマイザによる最適化繰り返し。

オプティマイザは一般に変数それぞれに対して独立に評価を行う。よって、最適化繰り返しの必要数は変数の数にスケールすると考えることができる。

```

    Variational Quantum Eigensolver
    θを初期化
    i ← 0, j ← 0
    while (オプティマイザが収束条件を満たさない) do
        for j ∈ [(全パーティション)] do
            for i ∈ [0(1/ε²)] do
                ψ(θ) (ansatz) の処理
                U (同時測定回路) の処理
                <ψ(θ)U†Hj|Uψ(θ)> の測定
                i ← i + 1
            end
            j ← j + 1
        end
        θの再設定
    end
    Return (min<sub>θ</sub>(Σ<sub>j</sub><H>))
    
```

図 1 VQE のアルゴリズム概要

①, ②の繰り返しは並列処理化が可能であるのに対し、③の繰り返しは単純な並列化はできないという特徴を持つ。

全体の計算コストについて考えたとき、量子ゲート深さ、パーティション数、オプティマイザが主な構成要素となる(第 3 章参照)。古典コンピュータのプログラムの計算コストはプロセッサ内の回路演算の数を数えることにより見積もるように、量子コンピュータの計算コストはプログラム全体のゲート処理の回数(正確には深さ)を数えることで見積もることができる。

計算コストは式(3)で表される。

$$(\text{計算コスト}) = \sum_i^M (\text{i番目に走行する量子回路のゲート深さ}) \quad (3)$$

オーダー表記で表すと式(4)のようになる。

$$(\text{計算コスト}) = O(\text{量子回路ゲート深さ}) \times O(\text{パーティション当たりのショット数}) \times O(\text{オプティマイザ評価数}) \quad (4)$$

### 3. アルゴリズム要素

VQE アルゴリズムの重要な構成要素としては、電子状態に基づく波動関数を表現する ansatz, 同時対角化を行うこ

とにより複数のオブザーバブルの期待値を同時に測定する同時測定回路, 最小の  $\langle H \rangle$  を得るために ansatz 中の  $\theta$  を最適化するオプティマイザがある。それぞれの要素は完全に独立ではなく関係しあうが、ここでは個別に考察する。

#### (1) Ansatz

VQE の量子回路は図 2 のように前段と後段に分けて考えることができる。前段は必要な  $|\psi(\theta)\rangle$  の波動関数を用意する ansatz であり、後段は複数の  $\langle \psi(\theta) | O_i | \psi(\theta) \rangle$  を同時に測定するための同時測定回路である。

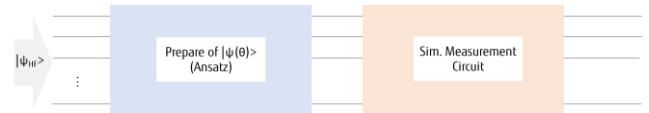


図 2 VQE の量子回路

Ansatz は盛んに研究されている VQE の 1 分野であり、物理実装の効率化に特化した Hardware efficient ansatz, Symmetry preserved ansatz, 古典的な量子化学計算でよく使用される Coupled Cluster 法をベースとした手法である UCCSD (Unitary Coupled Cluster Singles and Doubles), UCCSD をベースにその量子ゲート数や回路深さの量子ビットに対する発展を抑えた disentangled UCC などがある[5]。

本稿では、disentangled UCC の一種として研究されており、比較的浅い量子回路で実現可能なことが期待される Jastrow ansatz をベースとした量子回路を作成する。Jastrow ansatz は以下の式で表す[3]。

$$|\psi(\theta)\rangle = e^T |\psi_{HF}\rangle \quad (5)$$

$$e^T = e^K e^J e^{-K} \quad (6)$$

$$J = \sum_{jl, \sigma\tau} J_{jl}^{\sigma\tau} a_{j\sigma}^\dagger a_{j\sigma} a_{l\tau}^\dagger a_{l\tau} \quad (7)$$

$$K = \sum_{p>q, \sigma} (a_{p\sigma}^\dagger a_{q\sigma} - a_{q\sigma}^\dagger a_{p\sigma}) \quad (8)$$

一般的に、ansatz により生成される  $|\psi(\theta)\rangle$  は、初期状態であるハートリーフォック状態にユニタリな変換を作用させることで実現される。Jastrow ansatz の場合 exponential の部分は式(6)のような形をとる。式(8)は 1 電子の遷移(励起・脱励起)、式(7)では位相の回転を表現する。全体として式(6)は UCCSD と同じ 2 電子励起まで表現することができる。そのため UCCSD と同程度の精度を期待することができる。式(7), (8)の項の形から分かる通りそれぞれの項は 2 つの引数から構成されており、これは量子ビット数  $N$  に対して量子ゲート数が  $O(N^2)$  でスケールすることを意味する。また回路深さ  $O(N)$  で実装することができ、 $|\psi\rangle$  に埋め込むパラメータの数は  $O(N^2)$  となる。

## (2) 同時測定回路

ハミルトニアン  $H$  は、第二量子化の式(2)に対し Jordan-Wigner 変換または Bravyi-Kitaev 変換を行うことにより、以下の形で表すことができる。

$$H = \sum_i h_i O_i \quad (9)$$

ここで、 $h$  は実数の係数、 $O$  は  $N$  量子ビットのパウリ演算子を表す。パウリ演算子の数は  $O(N^4)$  となる。

一方で、パウリ行列が以下の交換関係を満たすのであれば、それらは同時測定が可能であることが知られている[4]。

$$O_i O_j = O_j O_i \quad (10)$$

ここで、パウリ演算子群  $\mathcal{C} \equiv \{O_i\}$  を、互いに可換な要素から構成される  $L$  個の部分群  $\mathcal{D}_l \equiv \{O_{j_m} | O_{j_m} O_{j_{m'}} = O_{j_{m'}} O_{j_m}\}$  に分解する ( $1 \leq l \leq L$ ;  $1 \leq m, m' \leq |\mathcal{D}_l|$ ;  $1 \leq j_1 < j_2 < \dots < j_{|\mathcal{D}_l|}$ )。これに基づき、下記のように部分ハミルトニアン  $H_{l,k}$  を定義する ( $1 \leq k \leq \lceil |\mathcal{D}_l|/N \rceil$ )。

$$H_{l,k} = \sum_{m=(k-1)N+1}^{\min(kN, |\mathcal{D}_l|)} h_{j_m} O_{j_m} \quad (11)$$

ここで、

$$H = \sum_{l=1}^L \sum_{k=1}^{\lceil |\mathcal{D}_l|/N \rceil} H_{l,k} \quad (12)$$

が成り立つ。ここで、適切な Clifford 演算子  $U_{l,k}$  を用いて

$$\langle \psi | H_{l,k} | \psi \rangle = \langle \psi U_{l,k}^\dagger | H'_{l,k} | U_{l,k} \psi \rangle \quad (13)$$

$$H'_{l,k} \equiv \sum_{m=(k-1)N+1}^{\min(kN, |\mathcal{D}_l|)} h_{j_m} Z_{(m-(k-1)N)} \quad (14)$$

と表せる。 $Z_{(m)}$  は  $m$  番目の量子ビットに  $Z$  ゲートがかかる演算子である。上式は、 $H_{l,k}$  に含まれる最大  $n$  個のオブザーバブルを同時に測定できることを意味する。

パウリ演算子群  $\mathcal{C}$  を部分群  $\mathcal{D}_l$  に分ける手法の一つとして Clique Cover (クリーク被覆) 問題を解くことによるグループ分けの手法が研究されており、本稿でも同様の手法を用いてパウリ演算子のグループ分けを行う。グループ分けされた  $\mathcal{D}_l$  一つ一つをパーティションと呼ぶ。パーティションの数は  $O(N^3)$  でスケールすることが知られている[6]。

## (3) オプティマイザ

ここまで、ansatz と同時測定回路を決定することにより低回路深さ同時測定型 VQE 量子回路の実装指針を示したが、対象分子のエネルギーは  $\phi$  におけるベクトル変数  $\theta$  を以下の条件で最適化することにより求めることができる。

$$E = \min_{\theta} \left( \sum_j \langle \psi(\theta) | H_j | \psi(\theta) \rangle \right) \quad (15)$$

本稿では、オプティマイザは Python のオープンソースプログラムである SciPy の既定のライブラリ関数から選択し

た。SciPy では BFGS, Powell, SLSQP などの手法が用意されており、本稿では Powell オプティマイザを選択する。Powell 法は解の勾配を評価しない手法のため、ノイズに強いという特性をもつためである。

オプティマイザは一般に、解に影響するベクトル変数  $\theta$  の要素一つ一つに対して変化させたときの解を評価するため、最適化に必要な繰り返し数は  $O(\text{パラメータの数})$  でスケールすると考えることができる。

## 4. シミュレーション条件

これまでに検討してきた VQE における計算コストを、シミュレーションで評価することを試みる。まず、シミュレーション条件を以下の様に定める。

### (1) 測定対象分子・Active Space

計算対象分子は水素分子 ( $H_2$ ) と水素化リチウム (LiH) を選択する。本稿では、4 量子ビットから 12 量子ビットまで、4 量子ビット刻みの条件でシミュレーションを行う。水素化リチウムは STO-3G 基底で 6 軌道、12 量子ビットに電子状態をマップすることができる。6 量子ビット、8 量子ビット、10 量子ビットに関しては、軌道の上からフリーズさせ (対象の量子ビット数の分だけ下からアクティブ化する) ことで、任意の量子ビット数のシミュレーション環境を作成する。

### (2) 必要とする精度とショット数

より現実的な条件に近づけるため、一部の評価はプロジェクトンエラーの発生を含めて行う。プロジェクトンエラーとは、測定対象の  $\phi$  が複数の基底の重ね合わせ状態からなることから発生する原理的エラーで、統計的な特性を持つ。パーティションに対する測定 1 回を 1 ショットと数えると、プロジェクトンエラーの影響 (値のばらつき) はショット数の逆二乗に比例する。本稿では、統計的エラーの影響は化学現象を再現可能な精度と呼ばれる化学的精度 (Chemical accuracy)  $1.6 \times 10^{-3}$  hartree 以内に収まるようにする。具体的には、プロジェクトンエラーにより影響を受ける解のばらつきが作る分布に対して、 $1\sigma < 1.6 \times 10^{-3}$  となるようにショット数を設定する。また、それぞれのパーティションに対して必要なショット数はラグランジュの未定乗数法により算出している。算出の際、以下の条件を前提とする。

$$\text{Var}(\langle \psi | O_i | \psi \rangle) = 1 \quad (16)$$

$$\text{Cov}(\langle \psi | O_i | \psi \rangle, \langle \psi | O_j | \psi \rangle) = 0 \quad (17)$$

Var は括弧内の分散、Cov は括弧内の共分散を表す。

### (3) プロジェクションエラーの取り扱い

本稿では、エラーは原理的なプロジェクションエラーのみを定義する。ゲートのオーバーローテーション、時間経過による緩和、読み出し時のエラーのようなハードに由来するエラーはシミュレータ上での設定は行わない。

計算リソース・シミュレーション負荷の都合上、4量子ビットのみ Qiskit に用意されている qasm simulator を使用し、計算結果にプロジェクションエラーの影響を付加する。

6量子ビット以上のシミュレーションではベクトルシミュレーションのみを行い、ansatz の量子ゲートを通して得られた波動関数  $|\phi(\theta)\rangle$  に対して  $\langle\phi(\theta)|H|\phi(\theta)\rangle$  を行列計算により直接求める。

また4量子ビットのシミュレーションにおいては、プロジェクションエラー有り無し両方についてのシミュレーションを行う。プロジェクションエラー有りのシミュレーションにおいて前述したショット数で  $\min(\langle H \rangle)$  に収束しなかった場合、収束するまでショット数を増やし統計的エラーの影響を低減する。この時のショット数の比率を  $k$  とおいたとき

$$\varepsilon' = \frac{\varepsilon}{\sqrt{k}} \quad (18)$$

の  $\varepsilon'$  をオプティマイザの収束に必要な統計エラー精度と定義し、6量子ビット以上の結果に関してもこの補正値を適用する。

さらに、プロジェクションエラーありの最適化は、そのエラーの存在のために収束に必要な評価数が増大する傾向になる。そこで、4量子ビットのシミュレーションにおいて、統計的エラーの有無による評価数の比を取得し、これも6量子ビット以上のシミュレーションにおけるオプティマイザによる評価数の補正値として適用する。

## 5. シミュレーション

ここでは、水素分子 ( $H_2$ )、STO-3G 基底関数、Jordan-Wigner 変換の条件下での低回路深さ同時測定型 VQE について、その具体的な内容を説明する。

### (1) パーティション化

$H_2$ /STO-3G/Jordan-Wigner の4量子ビットシミュレーションにおいては、ハミルトニアンは単位行列  $I$  の項も含めて15項の和の形で表される。(表1)

Pauli String	coefficient	Pauli String	coefficient
I	-0.09886	ZZ	-0.22279
Z0	0.17120	ZZ Z3	0.17435
Z0 Z1	0.16862	Z3	-0.22279
Z0 Z2	0.12054	X0 X1 Y2 Y3	-0.04532
Z0 Z3	0.16587	X0 Y1 Y2 X3	0.04532
Z1	0.17120	Y0 X1 X2 Y3	0.04532
Z1 Z2	0.16587	Y0 Y1 X2 X3	-0.04532
Z1 Z3	0.12054		

表1 ハミルトニアン内訳

これらを交換可能なパウリ行列にパーティション化すると、表2のように分けることができる。

Partition	Pauli Strings
Partition 1	Z0, Z0Z1, Z0Z2, Z0Z3, Z1, Z1Z2, Z1Z3, Z2, Z2Z3, Z3
Partition 2	X0X1Y2Y3, X0Y1Y2X3, Y0X1X2Y3, Y0Y1X2X3

表2  $H_2$ におけるパーティション化

### (2) 量子回路の生成

パーティション1, パーティション2それぞれについて量子回路の生成を行う。パーティション1はパウリ行列  $I$  または  $Z$  のみから構成されているため、後段回路の必要はない。共通となる前段部分の ansatz は位相の遷移を表現するための givens rotation 部, 位相回転を表現する phase rotation 部の組み合わせによって構成できる。後段回路はアダマールゲート, CNOT ゲート, CZ ゲートで構成することができる。

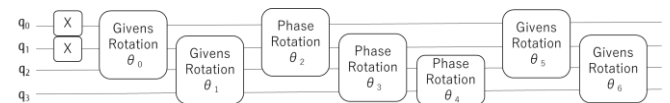


図3 パーティション1の量子回路

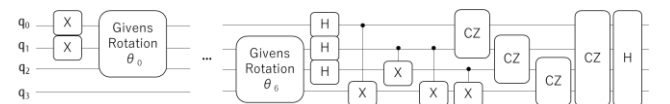


図4 パーティション2の量子回路

### (3) 必要なショット数の計算

計算結果に必要な統計精度  $1\sigma = 1.6 \times 10^{-3}$  が得られるようにショット数を決める。計算はラグランジュの未定乗数法により、それぞれの  $\langle\phi|O_i|\phi\rangle$  について式(16)(17)の条件で算出する。(表3)

Partition	Number of Shot
Partition 1	137,000
Partition 2	23,000

表3 ショット数

### (4) パラメタライズ

Ansatz 上にパラメータ  $\theta$  を埋め込む操作をパラメタライズと呼ぶ。物理的にどのような解釈で  $\theta$  を与えるかは、量子ビット数, 対象分子の電子軌道における占有軌道の数, 非占有軌道の数によって決まる。

水素分子の模式図と STO-3G 基底関数での電子の軌道を図5に示す。上向き矢印はアップスピン, 下向き矢印やダウンスピン, 実線部は占有軌道, 破線部は非占有軌道を表す。

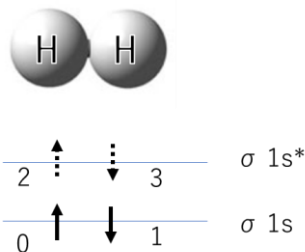


図5 水素分子の電子軌道

それぞれのパラメータ  $\theta$  に対して ansatz 上に持たせた解釈を図に示す。

$\theta$	解釈
1	02_1電子励起
2	13_1電子励起
3	02_位相回転
4	13_位相回転
5	23_位相回転
6	02_1電子脱励起
7	13_1電子脱励起

表4 パラメタライズ

このとき、占有軌道 1, 非占有軌道 1 の場合, 7 つのパラメータで 1 電子励起, 2 電子励起を表現する。電子の遷移はアップスピン→アップスピン, ダウンスピン→ダウンスピンのみを考える。占有軌道( $\sigma 1s$ )の電子間の位相回転は考慮しない。

### (5) 最適化

パラメータ  $\theta$  を Powell 法により最適化する。

図 6 左はプロジェクトンエラー無しシミュレーションの最適化の経過を示す。Exact な解に 4 回の iteration で収束した。同様に図 6 右は表 2, 表 3 で決定したショット数・パーティションでのプロジェクトンエラー有りシミュレーションの最適化の経過を示す。エラーによる収束の阻害を軽減するため, 上述したファクタ  $k=10$  とした。この結果 8 回の iteration を経て exact な解に収束したことが分かる。

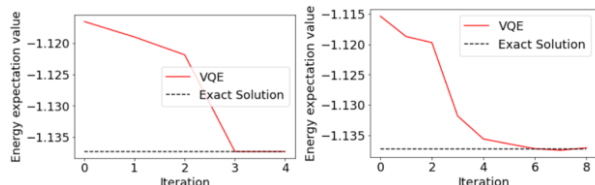


図6 Powell法によるVQEの収束

収束に必要なコスト, 収束時のエネルギーについて表 5 に示す。Iteration は最適化に必要な段階を表すが, 量子回路の実行回数と厳密には比例関係にない。最適化プロセスで得られた評価数を実際の回路実行回数としてカウントする。また得られたエネルギーについて, exact(Full-CI)からのずれはプロジェクトンエラー無しの場合は  $10^{-5}$  hartree 程度であり作成した量子回路で良い精度が獲得できたことを確認した。またプロジェクトンエラー無しの結果についても式(18)で予想した程度の誤差であった。

Simulation	#Iteration	#Evaluation (Circuit Run)	Achieved Energy [Hartree]	$\Delta E_{FCI}$ [Hartree]
w/o statistics error	4	386	-1.137276	0.00001
w/ statistics error	8	1001	-1.137894	0.00062

表5 オプティマイズの評価数・精度

## 6. 結果・検証

5章で説明した方法を用いて, さらに 8 - 12 量子ビットのシミュレーションを行い, 表 6 の結果を得た。また, 計算コストをグラフにしたものを図 7 に示す。

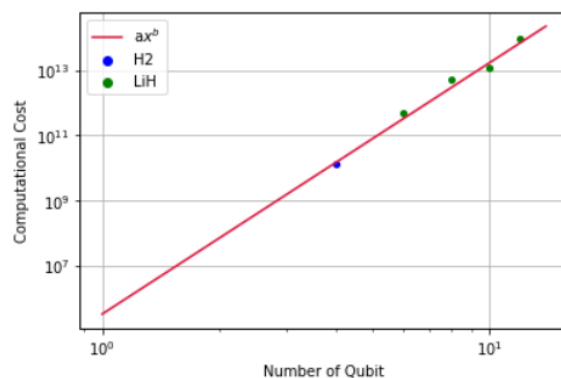
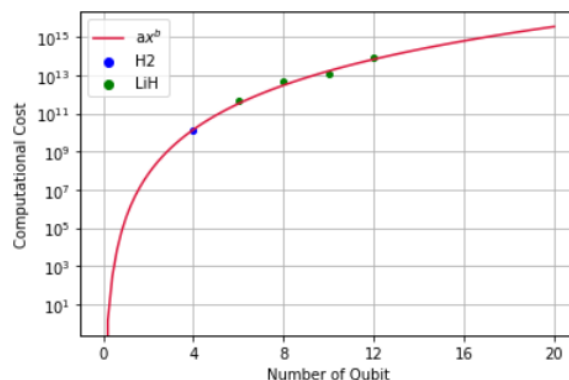


図7 シミュレーションで得られた計算コスト

上図が片対数, 下図が両対数軸  
フィッティングカーブの値は  $a=319k, b=7.73$

要素	4 qubit (H2)	6 qubit (LiH)	8 qubit (LiH)	10 qubit (LiH)	12 qubit (LiH)	Ratio 4-12	Expect Ratio
Circuit depth (2qubit)	8	14	18	28	38	$O(N^{1.4})$	$O(N)$
#Partition	2	9	9	9	18	$O(N^{1.8})$	$O(N^3)$
#Total Shot	1,600,000	24,275,000	28,305,000	34,956,000	58,162,000	$O(N^{3.3})$	$O(N^3)$
#Parameter	7	13	30	51	76	$O(N^{2.3})$	$O(N^2)$
#Evaluation	1,000	1,500	10,000	13,000	42,000	$O(N^{4.0})$	$O(N^2)$
Computational Cost	$1.28 \times 10^{10}$	$5.10 \times 10^{11}$	$5.09 \times 10^{12}$	$1.27 \times 10^{13}$	$9.28 \times 10^{13}$	$O(N^{7.7})$	$O(N^6)$

表 6 4-12 量子ビットでのシミュレーション結果

それぞれの項目について比較すると、まず回路深さではシミュレーションを実施した領域に対して  $O(N^{1.4})$  のスケールが見られ、これは当初予測した  $O(N)$  と比較するとほぼ予測通りと言える。補足として、回路深さはそれぞれの量子ビットで同じ条件で比較するため、ansatz のみの 2 量子ビットゲート回路深さをカウントしている。同様に、パーティション数は  $O(N^{1.8})$ 、ショット数は  $O(N^{3.3})$ 、パラメータ数は  $O(N^{2.3})$ 、評価数は  $O(N^{4.0})$  が得られた。また、これらを総合して算出した計算コストについては  $O(N^{7.7})$  のスケールを得た。

比較対象の一つとしての同時測定を用いない通常の UCCSD について、回路深さは少なくとも  $O(N^3)$ 、パラメータは  $O(N^4)$  であると知られている [7]。そのため UCCSD の計算コストは式(4)に従うと  $O(N^4)$  でスケールすると予想でき、本稿の低回路深さ同時測定型 VQE のシミュレーション結果と比較すると、指数で約 4.3 の改善が見られたと言えることができる。一方で、古典的計算手法 CCSD の計算コスト [8] である  $O(N^6)$  と比較すると、まだ指数で約 1.7 大きい。

## 7. 考察

本稿で作成した低回路深さ同時測定型 VQE アルゴリズムでは、一般的な UCCSD ansatz を使用した VQE アルゴリズムと比較して大きな改善が得られたが、一方で従来の古典的手法である CCSD には計算コストの点でまだ届かないという結果が得られた。しかし、シミュレーションにより、古典計算を上回るために更なる改善が必要な点が見えてきたため、それらの点において計算コストの削減を進めることによって量子アドバンテージを得る可能性は十分にあると言えるだろう。

表のそれぞれの項目について着目すると、評価数以外の項目については概ね想定通りであるのに対し、評価数については期待された  $O(N^2)$  に対して得られた値が  $O(N^4)$  と大きな隔たりが見られる。これは Powell オプティマイザによる最適化の過程において、プロジェクトンエラーによるエネルギーのぶれ、変数の多さによる最適化への負荷、ま

た Jastrow ansatz に特徴的な波動関数のエンタングル状態、などがもたらしたものと考えることができる。

本稿ではオプティマイザとして SciPy で用意されている広い用途にわたって最適化可能なものを使用したが、上記の特徴を加味し、オプティマイザに条件をつけるか専用のものを作成することによって状況が改善される可能性がある。

また、オプティマイザに限らず、パーティション分けについても改善の可能性がある。交換可能なパウリ行列のグループ分けについて、パーティション数を確実に最小にするアルゴリズムは NP-Hard であることが知られており、現実的には heuristic な手法により問題を解くことが求められる。本稿ではそこまで特別な条件付けを行わなかったが、ショット数が小さくなるようにグループ分けに条件を与えることにより計算コストが下げられる可能性がある。

VQE が古典コンピュータによる量子化学計算に対してアドバンテージを持つか、という疑問は多くの方々の興味を示すところである。こういった VQE の要素ごとの詳細な調査によって、不足な点や改善可能な点が明らかにされ、疑問に対する答えが少しずつ明瞭になっていくことが期待される。

## 参考文献

- [1] 杉崎研司. 量子コンピュータによる量子化学計算入門. 講談社, 2020.
- [2] Daochen Wang, Oscar Higgott, and Stephen Brierley, Accelerated Variational Quantum Eigensolver, Phys. Rev. Lett. 122, 140504 (2019).
- [3] Yuta Matsuzawa and Yuki Kurashige, A Jastrow-type decomposition in quantum chemistry for low-depth quantum circuits, J. Chem. Theory Comput. (2020), 16, 944–952.
- [4] Pranav Gokhale et al. Minimizing State Preparations in Variational Quantum Eigensolver by Partitioning into Commuting Families, arXiv preprint arXiv: 1907.13623, (2019).
- [5] Francesco A. Evangelista, Garnet Kin-Lic Chan, and Gustavo E. Scuseria. Exact Parameterization of Fermionic Wave Functions via Unitary Coupled Cluster Theory, J. Chem. Phys. 151, 244112 (2019).

- [6] William J. Huggins et al., Efficient and Noise Resilient Measurements for Quantum Chemistry on Near-Term Quantum Computers, npj Quantum Information volume 7, Article number: 23 (2021).
- [7] Michael Kuhn et al., Accuracy and Resource Estimations for Quantum Chemistry on a Near-term Quantum Computer, J. Chem. Theory Comput. (2019), 15, 9.
- [8] K. Raghavachari, G. W. Trucks, J. A. Pople, and M. Head-Gordon, A fifth-order perturbation comparison of electron correlation theories, Chem. Phys. Lett. 157, 479 (1989).