

# エンタングルした測定を用いた VQE の効率化

濱村 一航<sup>1,a)</sup> 今道 貴司<sup>1</sup>

**概要:** 近年、量子変分固有ソルバー (VQE) に関する研究が盛んに行なわれている。特に、物理量の期待値を効率的に評価する様々な手法が提案されている。テンソル積基底測定を用いた同時測定へのグルーピングアルゴリズムは様々な研究に用いられている。本発表では、エンタングルした測定を用いて、利用可能な同時測定の選択肢を増やすことで、測定の評価回数を減らす手法について発表する。エンタングルした測定を用いたグルーピングには、すべての測定を用いる場合と、一部の測定を用いる場合の2つの場合がある。エンタングルした測定の一部を用いる場合、測定に対応する量子回路の深さが一定になるという利点がある。一方、すべてのエンタングルした測定を用いたグルーピングは、一部のエンタングル測定を用いたグルーピングよりもグループ数を減らせる可能性があるが、グルーピング自体は難しくなる。我々は、グルーピングのための様々な彩色戦略を比較し、分子や変換によって彩色の最適戦略が異なることを発見した。

**キーワード:** 同時測定, エンタングルした測定, VQE (Variational Quantum Eigensolver)

## Entangled measurements make variational quantum eigensolver fast

**Abstract:** The Variational Quantum Eigensolver has been intensively studied in recent years. In particular, various methods to evaluate quantum observables efficiently have been proposed. A grouping algorithm with Tensor Product Basis measurements has been used for various studies. One can reduce the number of evaluations of observables with entangled measurements thanks to more choices joint measurements. There are two types of grouping with entangled measurements: using all of them and using a part of them. The advantage of using a part of entanglement measurements is that quantum circuits corresponding to the measurements have a constant- depth. On the other hand, grouping using all entangled measurements has potential to reduce the number of group more than that by a part of entangled measurements, but the grouping itself is more difficult. The grouping of joint measurements can be seen as a graph coloring problem. We compare various coloring strategies through experiments and we found that different molecules and transformation have different optimal strategies for coloring.

**Keywords:** Joint measurements, Entangled measurements, VQE (Variational Quantum Eigensolver)

### 1. 背景

VQE (Variational Quantum Eigensolver) はここ数年の間で急速に進展している。特に、物理量の評価の効率の改善は大きく進展している [1], [2], [3], [4], [5], [6], [7], [8], [9], [10], [11], [12].

物理量  $A$  は次の形で与えられている。

$$A = \sum_{i=1}^n a_i P_i, \quad (1)$$

ここで、 $a_i$  は実数の係数、 $P_i \in \{I, X, Y, Z\}^{\otimes N}$  は  $N$  量子ビットの恒等演算子  $I$  を含めた Pauli 演算子のテンソル積する。この Pauli 演算子のテンソル積は Pauli 文字列と呼ばれている。物理量  $A$  が与えられたときにその期待値  $\langle A \rangle = \langle \sum_{i=1}^n a_i P_i \rangle$  を量子コンピューターを用いて計算することを考える。この期待値を評価する方法はいくつも考えられているが、もっともよく使われている方法は線形性を用いて分解し、各 Pauli 文字列の期待値を測定する方法である。すなわち、量子コンピューターを用いて期待値  $\langle P_i \rangle$  を評価し、その線形結合から期待値  $\langle A \rangle = \sum_{i=1}^n a_i \langle P_i \rangle$  を求める。Pauli 文字列の期待値  $\langle P_i \rangle$  は測定の前のユニタリ

<sup>1</sup> IBM Quantum, IBM Research – Tokyo, Chuo-ku, Tokyo, 103-8510, Japan

<sup>a)</sup> ikko.hamamura1@ibm.com

回転とサンプリングによって評価することができる。例えば、Pauli  $Z$  の測定には測定前の回転は不要であるが、Pauli  $X$  の測定には Hadamard ゲートを用いて基底の変換を行ない、Pauli  $Y$  の測定には  $S^\dagger$  ゲートと Hadamard ゲートを用いて基底の変換を行なう。

いくつかの Pauli 文字列の組は同時測定可能である。1量子ビットゲートの測定前のユニタリ回転を用いた測定のことを TPB(Tensor Product Basis)での測定という。期待値の評価をする際の同時測定として TPB 測定が用いられていた [13]。ここで重要な点は、TPB 測定を用いて同時測定可能な Pauli 文字列の組に物理量を変換する必要があるという点である。この問題はグルーピング問題と言われており、量子ビットごとに可換なグラフの補グラフの彩色問題に対応しており、NP 完全問題である [1]。この補グラフはしばしば TPB 測定の Pauli グラフと呼ばれている。NP 完全問題であるこのグルーピング問題は効率的に解けないので、この問題を克服するためには LDFC(Largest Degree First Coloring) アルゴリズムといったヒューリスティックアルゴリズムを用いて、近似解を求めている。厳密解である保証はないが、TPB の Pauli グラフについては準最適であることがいくつかの例で示されている [9]。

## 2. 結果

### 2.1 結果の要約

本講演は我々の以前の結果 [9] と未発表の結果 [14] に基づく。

我々は物理量の評価には TPB 測定だけではなくエンタングルした測定も有用であることを示した。エンタングルした測定の重要な例は Bell 測定である。Bell 測定は  $X \otimes X$ ,  $Y \otimes Y$ ,  $Z \otimes Z$  の同時測定になっている。この観点から、エンタングルした測定は同時測定の選択肢を増やしている。図 1 にこの状況を示す。エンタングルした測定を用いることで測定の数を減らすことが出来ることが示唆されている。

しかしながら、エンタングルした測定を物理量の評価に用いるのには困難な点が 3 つある。1 つ目は量子回路の深さが増えることである。先の Bell 測定の例にもあるように、測定に CNOT ゲートを用いている。大きくエンタングルした測定には多くのエンタングラー (例えば CNOT) ゲートが必要であり、エンタングラーゲートは一般に 1量子ビットゲートよりもノイズが多い。2 つ目は全測定の Pauli グラフは TPB のものより解くのが難しいという点である。エッジの数が減るにつれて、彩色問題を解くのが難しくなっているのかもしれない。これは、LDFC アルゴリズムの解が最適解から遠くなっている可能性があるということである。3 つ目はグルーピングしたことによる共分散が負の効果をもたらす可能性があるという点である。この共分散効果については過去に McClean ら [15] によって指

摘されている。

過去の論文 [9] とその続編 [14] の主な貢献は次の通りである：

- (1) 一部のエンタングルした測定のみを用いた Pauli 文字列のグルーピングアルゴリズムを提案した。
- (2) 共分散効果を抑えるためにグループの大きさに基づいた測定の戦略を提案した。
- (3) 全ての測定を使う場合には、従来手法の LDFC アルゴリズムでは最適解に近いことを示した。
- (4) 分子ごとに適した彩色の戦略が異なることを示した。
- (5) 提案手法を小さなハミルトニアンについて実際の量子コンピューターで動作することを確認した。

1 は 1 つ目の、2 は 3 つ目に、3 と 4 は 2 つ目の困難な点に関係している。最後の 5 つ目は、量子コンピューターの実機での実験によって我々の手法の有効性を示している。

### 2.2 一部のエンタングルした測定を用いる場合

我々は一部のエンタングルした測定のみを用いる Greedy アルゴリズムを提案した。アルゴリズムの詳細は [9] の Algorithm 1 と 2 にある。このアルゴリズムの特徴は CNOT の深さが定数になることである。例えば、2量子ビットのエンタングルした測定しか用いないとすると、追加の CNOT の深さは 1 である。我々の提案手法は利用するエンタングルした測定に応じて回路の深さを調整することが出来るので、1 つ目の困難な点を克服している。Bell 測定と我々の Greedy アルゴリズムを用いたときのグループの数は、全てのエンタングルした測定を用いて LDFC アルゴリズムでグルーピングしたときのグループの数と Jordan-Wigner 変換の場合にはほとんど同じである ([9] の Table 1 参照)。これは、全測定の Pauli グラフが LDFC アルゴリズムにとって非常に複雑になっているため、全てのエンタングルした測定の利点を活かすことが出来ていないことを示唆している。

### 2.3 彩色の戦略の調査

そこで、Pauli 文字列をグルーピングするための LDFC 以外の彩色の戦略を調査した。TPB 測定で同時測定可能な組へのグルーピングについては、いくつかの先行研究がある。Verteletskyi ら [16] は TPB において Greedy 彩色アルゴリズムを比較している。我々の既存研究では [9]、TPB 測定のグルーピングについては LDFC アルゴリズムの解が最適解に近いことを、最大クリークの大きさと近いことから示している。しかし、全エンタングルした測定については、先にも述べたように LDFC アルゴリズムでは不十分であることが示唆されていた。

そこで、我々は最も良い彩色アルゴリズムを探すためにいくつかの彩色アルゴリズムを比較することにした。比較

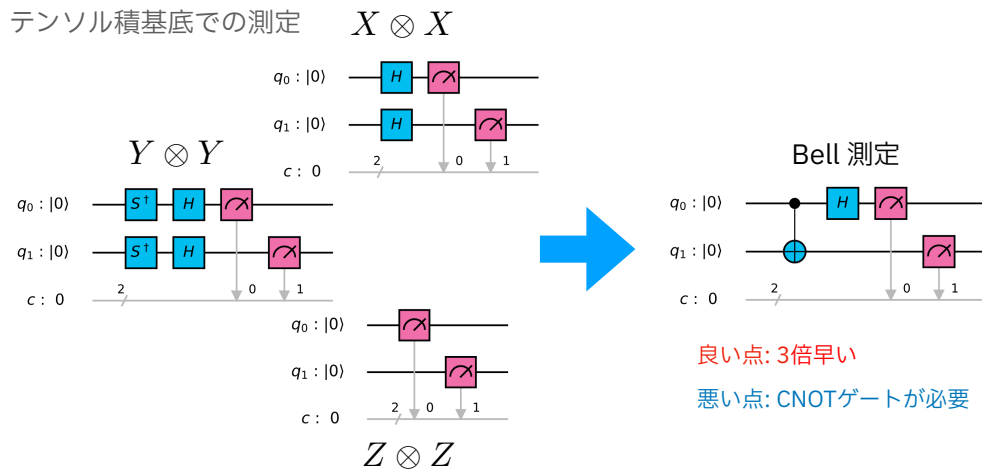


図 1: エンタングルした測定を用いた同時測定の例. Bell 測定は 3 種類の測定を同時にすることが出来る.

分子	変換	量子ビット数	グルーピングなし	全測定	全測定	全測定
				(largest_first)	(independent_set)	(CP Optimizer)
LiH	JW	12	631	35	26	17
LiH	Parity	12	631	35	24	17
LiH	BK	12	631	35	25	17
BeH <sub>2</sub>	JW	14	1150	57	41	38
BeH <sub>2</sub>	Parity	14	1150	58	41	39
BeH <sub>2</sub>	BK	14	1150	58	41	39
H <sub>2</sub> O	JW	14	1858	83	70	63
H <sub>2</sub> O	Parity	14	1858	84	69	61
H <sub>2</sub> O	BK	14	1858	78	72	62
NH <sub>3</sub>	JW	16	4957	129	154	122
NH <sub>3</sub>	Parity	16	4957	122	160	123
NH <sub>3</sub>	BK	16	4957	118	157	123
HCl	JW	20	4427	108	85	79
HCl	Parity	20	4427	112	86	105
HCl	BK	20	4427	121	88	85

表 1: エンタングルした測定を用いた Pauli グラフのグルーピングの結果

には Networkx [17] の `greedy_color` を用いた. 全体のサマリーとしていくつかのグルーピングの結果を表 1 に示した. グルーピングをしない場合と比較して, 全ての測定を用いた場合は必要な測定の数大幅に減らしている. アルゴリズムについても既存手法の `largest_first` よりも新たに試した `independent_set` が NH<sub>3</sub> を除いて, 良い結果を示している.

また, 全測定の彩色問題に IBM CP Optimizer を用いて, 1 時間の時間制限のもとで Greedy アルゴリズムによる解がどのくらい改善できる可能性があるかを確認した. ここで, 探索空間を狭くするために対称性を壊す方法を用いている. CP Optimizer の結果は “全測定 (CP Optimizer)” 列に示した. IBM CP Optimizer のような厳密解法も有用であるが, 解を発見するのに長い時間がかかるので, 大きな分子には適さない.

`independent_set` と CP Optimizer の結果を比較すると, Greedy アルゴリズムはさらに改善できる可能性があることが示唆されている. さらに, 様々な戦略 [18] ごとのグルーピングによって測定の種類を減らすことが出来るか調べた. グループの数を表 2 に示す. 多くの場合において `independent_set` の結果が良いが, NH<sub>3</sub> については LDFC アルゴリズムの結果が良い.

色交換アルゴリズム [19] を用いた彩色アルゴリズムについても調べた. その結果を表 3 にまとめている. LDFC アルゴリズムを色交換アルゴリズムありで実行した場合は, H<sub>2</sub>O を Jordan-Wigner 変換と Bravyi-Kitaev 変換した場合と, NH<sub>3</sub> を Jordan-Wigner 変換した場合については前の結果を含めても最も良い結果が得られている.

この比較結果から, 分子や変換ごとにグラフの彩色の最適な戦略は異なることがわかる. 多くの場合は

Molecule	Trans-formation	largest_ first	random_ sequential	smallest_ last	independent_ set	connected_ sequential_bfs	connected_ sequential_dfs	saturation_ largest_first
LiH	JW	35	39	32	<b>26</b>	41	42	28
LiH	Parity	35	38	35	<b>24</b>	40	44	26
LiH	BK	35	44	33	<b>25</b>	41	49	26
BeH <sub>2</sub>	JW	57	65	55	<b>41</b>	62	75	50
BeH <sub>2</sub>	Parity	58	65	58	<b>41</b>	63	78	49
BeH <sub>2</sub>	BK	58	65	60	<b>41</b>	60	73	48
H <sub>2</sub> O	JW	83	99	92	<b>70</b>	83	94	82
H <sub>2</sub> O	Parity	84	96	95	<b>69</b>	80	93	73
H <sub>2</sub> O	BK	78	96	95	<b>72</b>	86	104	<b>72</b>
NH <sub>3</sub>	JW	<b>129</b>	189	196	154	143	165	152
NH <sub>3</sub>	Parity	<b>122</b>	191	187	160	157	162	153
NH <sub>3</sub>	BK	<b>118</b>	187	208	157	150	160	154
HCl	JW	108	164	127	<b>85</b>	137	163	100
HCl	Parity	112	162	133	<b>86</b>	146	163	101
HCl	BK	121	173	133	<b>88</b>	141	161	103

表 2: Networkx を用いた Pauli グラフの Greedy グラフ彩色

Molecule	Trans-formation	largest_ first	random_ sequential	smallest_ last	connected_ sequential_bfs	connected_ sequential_dfs
LiH	JW	<b>26</b>	34	30	30	33
LiH	Parity	<b>26</b>	34	33	31	39
LiH	BK	<b>30</b>	34	31	<b>30</b>	37
BeH <sub>2</sub>	JW	<b>48</b>	56	51	51	59
BeH <sub>2</sub>	Parity	48	59	50	<b>47</b>	61
BeH <sub>2</sub>	BK	<b>48</b>	58	53	49	61
H <sub>2</sub> O	JW	<b>67</b>	81	77	73	83
H <sub>2</sub> O	Parity	<b>70</b>	86	76	71	86
H <sub>2</sub> O	BK	<b>68</b>	84	84	74	84
NH <sub>3</sub>	JW	<b>125</b>	165	165	149	154
NH <sub>3</sub>	Parity	<b>130</b>	160	161	144	156
NH <sub>3</sub>	BK	<b>132</b>	165	169	143	148
HCl	JW	<b>110</b>	145	113	113	145
HCl	Parity	112	144	113	<b>108</b>	144
HCl	BK	120	142	<b>105</b>	114	144

表 3: Networkx を用いた Pauli グラフの色交換オプションありの Greedy グラフ彩色

independent\_set の Greedy アルゴリズムが他のアルゴリズムより優れているようだが, inter change がある場合の largest\_first も最良の戦略となっている場合がある. 未知の分子については, 並列にいくつかの方法を試し, 最も良い結果を利用するのが良いと考える.

## 2.4 共分散効果

共分散効果の問題については各グループに含まれる要素の数に比例するようにショット数を調節すれば, 共分散効果を抑えることができることを示した [9]. したがって, 共分散効果は常に避けることができる. これは, 我々の提案が3つ目の問題点を克服したことを意味する. 一方で現在

のデバイスでは量子回路ごとに shot 数を設定できないため, あくまで理論上克服可能ではあるが, 実際には実装できていない.

## 2.5 実機を用いた検証

過去の研究においても, 2量子ビットのハイゼンベルグモデルについて提案手法をデモンストレーションしていた [9]. Bell 測定を用いたグルーピングは TPB 測定を用いたグルーピングと比べて, 基底状態への収束が早かった. Bell 測定は平均的には TPB 測定よりもよい値に収束していた. しかし, 最も良く収束した値は TPB グルーピングによって得られていた. これは, エンタングルした測定に必

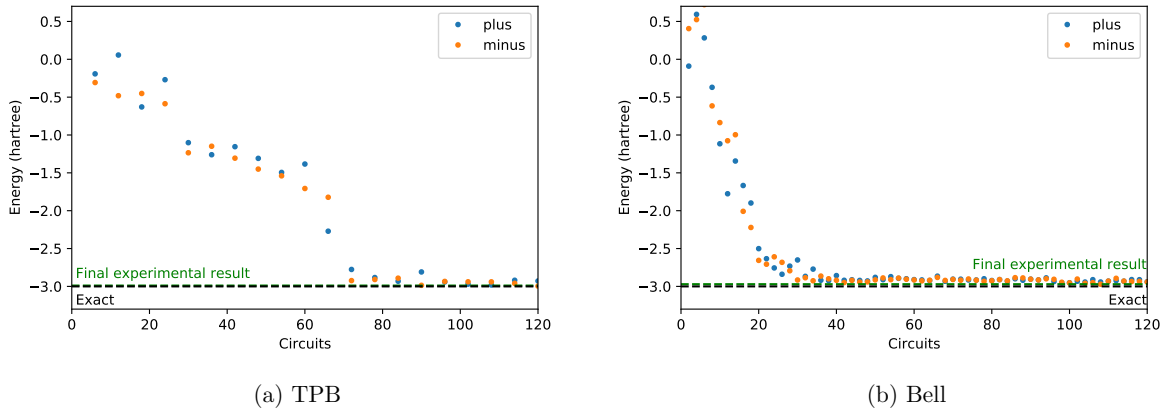


図 2: 2 量子ビットハイゼンベルグモデルにおける VQE の TPB と Bell 測定によるグルーピング手法の比較

要な追加の CNOT ゲートに含まれるエラーのせいであると考えられる。そこで、本講演に向けて、過去の論文で使用したデバイスよりも性能の良い量子ボリュームが 32 の *ibmq\_rome* を用いて、再実験を行なった。その結果を図 2 に示す。実験の設定は用いたデバイスを除き [9] と同じである。深さ 1 の Ry 変分波動関数と SPSA optimizer を用いた。収束値は両方の手法においてほとんど同じ値になるくらいに改善されている。Bell グルーピングを用いた場合の収束は、TPB グルーピングの場合と比べて、期待通り 3 倍程度早くなっている。しかし、まだ、収束値と厳密解の間には、僅かな違いがある。さらに収束値を改善するためには、8192 回のショット数では不十分であり更に多くのサンプリングが必要であると考えている。

参考文献

- [1] Jena, A., Genin, S. and Mosca, M.: Pauli Partitioning with Respect to Gate Sets. Preprint at <https://arxiv.org/abs/1907.07859> (2019).
- [2] Yen, T.-C., Verteletskyi, V. and Izmaylov, A. F.: Measuring All Compatible Operators in One Series of Single-Qubit Measurements Using Unitary Transformations, *Journal of Chemical Theory and Computation*, Vol. 16, No. 4, pp. 2400–2409 (online), DOI: 10.1021/acs.jctc.0c00008 (2020). PMID: 32150412.
- [3] Gokhale, P., Angiuli, O., Ding, Y., Gui, K., Tomesh, T., Suchara, M., Martonosi, M. and Chong, F. T.: Minimizing State Preparations in Variational Quantum Eigensolver by Partitioning into Commuting Families. Preprint at <https://arxiv.org/abs/1907.13623> (2019).
- [4] Izmaylov, A. F., Yen, T.-C. and Ryabinkin, I. G.: Revising the measurement process in the variational quantum eigensolver: is it possible to reduce the number of separately measured operators?, *Chem. Sci.*, Vol. 10, pp. 3746–3755 (online), DOI: 10.1039/C8SC05592K (2019).
- [5] Huggins, W. J., McClean, J., Rubin, N., Jiang, Z., Wiebe, N., Whaley, K. B. and Babbush, R.: Efficient and Noise Resilient Measurements for Quantum Chemistry on Near-Term Quantum Computers. Preprint at <https://arxiv.org/abs/1907.13117> (2019).
- [6] Zhao, A., Tranter, A., Kirby, W. M., Ung, S. F., Miyake, A. and Love, P. J.: Measurement reduction in variational quantum algorithms, *Phys. Rev. A*, Vol. 101, p. 062322 (online), DOI: 10.1103/PhysRevA.101.062322 (2020).
- [7] Crawford, O., van Straaten, B., Wang, D., Parks, T., Campbell, E. and Brierley, S.: Efficient quantum measurement of Pauli operators. Preprint at <https://arxiv.org/abs/1908.06942> (2019).
- [8] Gokhale, P. and Chong, F. T.:  $O(N^3)$  Measurement Cost for Variational Quantum Eigensolver on Molecular Hamiltonians. Preprint at <https://arxiv.org/abs/1908.11857> (2019).
- [9] Hamamura, I. and Imamichi, T.: Efficient evaluation of quantum observables using entangled measurements, *npj Quantum Inf.*, Vol. 6, No. 1, p. 56 (online), DOI: 10.1038/s41534-020-0284-2 (2020).
- [10] Huang, H.-Y., Kueng, R. and Preskill, J.: Predicting many properties of a quantum system from very few measurements, *Nature Physics*, Vol. 16, No. 10, pp. 1050–1057 (online), DOI: 10.1038/s41567-020-0932-7 (2020).
- [11] Hadfield, C., Bravyi, S., Raymond, R. and Mezzacapo, A.: Measurements of Quantum Hamiltonians with Locally-Biased Classical Shadows (2020).
- [12] Huang, H.-Y., Kueng, R. and Preskill, J.: Efficient estimation of Pauli observables by derandomization (2021).
- [13] Kandala, A., Temme, K., Córcoles, A. D., Mezzacapo, A., Chow, J. M. and Gambetta, J. M.: Error mitigation extends the computational reach of a noisy quantum processor, *Nature*, Vol. 567, No. 7749, pp. 491–495 (online), DOI: 10.1038/s41586-019-1040-7 (2019).
- [14] Hamamura, I. and Imamichi, T.: To appear (2021).
- [15] McClean, J. R., Romero, J., Babbush, R. and Aspuru-Guzik, A.: The theory of variational hybrid quantum-classical algorithms, *New J. Phys.*, Vol. 18, No. 2, p. 023023 (online), available from <http://stacks.iop.org/1367-2630/18/i=2/a=023023> (2016).
- [16] Verteletskyi, V., Yen, T.-C. and Izmaylov, A. F.: Measurement Optimization in the Variational Quantum Eigensolver Using a Minimum Clique Cover. Preprint at <https://arxiv.org/abs/1907.03358> (2019).
- [17] Hagberg, A. A., Schult, D. A. and Swart, P. J.: Exploring Network Structure, Dynamics, and Function using NetworkX, *Proceedings of the 7th Python in Science Conference* (Varoquaux, G., Vaught, T. and Millman, J., eds.), Pasadena, CA USA, pp. 11 – 15 (2008).
- [18] Kosowski, A. and Manuszewski, K.: Classical coloring of graphs, *Contemporary Mathematics*, Vol. 352, pp. 1–20 (2004).
- [19] Deo, N., Kowalik, J. S. et al.: *Discrete optimization algorithms: with Pascal programs*, Courier Corporation (2006).