Vol.2021-QS-4 No.2
2021/10/14

NISQデバイスを用いた分配関数の計算

松本佳大[1,2]　神宮裕汰[1,2]　遠藤傑[3]　川畑史郎[2]　渡部昌平[1]　二国徹郎[1]　箱嶋秀昭[2]　松崎雄一郎[2]

概要：自由エネルギーは系の熱力学的な性質を含む重要な量である．ノイズあり中規模量子（NISQ）デバイスを用いて自由エネルギーを計算する方法が知られているが，Gibbs 状態のコピーを大量に用意して，外挿法による計算を実行する必要があるため，使用する量子ビットの数が増大してしまうという難点があった．そこで我々は，NISQ デバイスを用いた自由エネルギー計算のより効率的な方法を提案する．本手法では，変分量子虚時間発展により Gibbs 状態を準備して，温度の異なる Gibbs 状態間のオーバーラップを NISQ デバイスで求めることで, 分配関数および，自由エネルギーを求める．この手法では N 量子ビットの系の分配関数を求めるのに $2N$ 量子ビットを利用すれば良い．これは従来手法よりも必要な量子ビット数が少なくてすむ．性能評価のために Heisenberg 模型に関して数値計算を行い，実際に高い精度で自由エネルギーを再現した．

1. はじめに

平衡統計力学においては，系の微視的なハミルトニアンの分配関数 Z を計算することによって，重要な熱力学量である自由エネルギー F を次式で計算できる [1]：

$$F = -k_{\mathrm{B}}T \ln Z. \tag{1}$$

ここで T は絶対温度，k_{B} はボルツマン定数である．分配関数 Z がわかれば系の平衡状態についての情報をすべて知ることが可能である．しかし，一般的に，分配関数を計算することは難しい．例えば N 量子ビット系の Ising 模型の分配関数を厳密に計算するためには，2^N 個の状態について和をとる必要がある．また，非対角項を持つ Heisenberg 模型のようなハミルトニアンの分配関数の計算は，古典計算機では厳密対角化が必要になるため，さらに困難なものとなる．そのため，近年実現可能な量子コンピュータを用いて，系の熱力学的な性質を与える分配関数を求めることは極めて重要な課題である．

近年のデバイス製造・実装・制御の発達により，誤り耐性のない中規模の量子コンピュータが近い将来実現可能であると言われており，その活用法が現在活発に模索されている．このような計算機は，ノイズあり中規模量子（NISQ:Noisy Intermediate Scale Quantum）デバイスと呼ばれており，数十〜数百量子ビットの量子ビットが含まれ，ゲートエラー率は 10^{-3} 程度である [2]．NISQ アルゴリズムは，量子化学・機械学習・金融など [3–6] 様々な応用先が提案されているため，幅広く注目を集めている [7]．さらに，変分量子シミュレーション [8–14] とよばれる NISQ のアルゴリズムも提案されており，量子系の時間発展を計算することで，虚時間発展方程式の解をシミュレートすることが可能である [15]．この手法により，量子系の基底状態を，通常の VQE（Variational Quantum Eigensolver）[8,9] に比べて効率的に得ることができる．さらに，注目する量子ビットに補助量子ビットを結合させ虚時間発展を行うことで，Gibbs 状態 $\hat{\rho}_{\mathrm{th}}$ を純粋化した TFD(thermofield double states) という熱平衡状態を生成する手法も提案されている [14]．また，熱平衡状態を生成する方法は他にもいくつか提案されている [16–23].

NISQ デバイスを用いて自由エネルギーを計算する方法が知られている [16–19, 24]．自由エネルギーは，内部エネルギー $E = \mathrm{Tr}[\hat{\rho}_{\mathrm{th}}\hat{H}]$ とフォンノイマンエントロピー $S = -\mathrm{Tr}[\hat{\rho}_{\mathrm{th}} \ln \hat{\rho}_{\mathrm{th}}]$ から構成されている：

$$F = E - TS = \mathrm{Tr}[\hat{\rho}_{\mathrm{th}}\hat{H}] + T\mathrm{Tr}[\hat{\rho}_{\mathrm{th}} \ln \hat{\rho}_{\mathrm{th}}]. \tag{2}$$

第 1 項の内部エネルギー E はハミルトニアン $\hat{H}$ をオブザーバブルとして選ぶことで計測可能であるため，第 2 項のフォンノイマンエントロピー S の計測法が重要な課題となっていた．次に示すレニーエントロピー

[1] 東京理科大学
Department of Physics, Tokyo University of Science, 1-3, Kagurazaka, Shinjuku-ku, Tokyo, 162-8601, Japan
[2] 国立研究開発法人産業技術総合研究所
Research Center for Emerging Computing Technologies, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), Umezono1-1-1, Tsukuba, Ibaraki 305-8568, Japan.
[3] NTT Computer and Data Science Laboratories, NTT Corporation, Musashino, Tokyo 180-8585, Japan

ⓒ 2021 Information Processing Society of Japan

$$S_p(\hat{\rho}_{\rm th}) = \frac{1}{1-p}\ln\left(\mathrm{Tr}[\hat{\rho}_{\rm th}^p]\right) \tag{3}$$

に対して，$p \to 1$ の極限をとることで，フォンノイマンエントロピー S が得られることが知られている [25, 26]．そのため，これまでは，レニーエントロピーを高次まで求め，外挿法により近似的にフォンノイマンエントロピーを求めるアプローチが採用されていた [16, 27]．N 量子ビット系の Gibbs 状態 $\hat{\rho}_{\rm th}$ に対する p 次のレニーエントロピーを求めるために必要な量子ビット数は $\mathcal{O}(pN)$ である．このとき，近似の精度を向上させるためには, 高次のレニーエントロピーを求める必要がある．p を増やすにつれて必要な量子ビットの数が増大してしまう点が, NISQ で自由エネルギーを求めることを困難にしていた．

我々は変分量子シミュレーションを用いることで，より少ない量子ビット数で，自由エネルギー（分配関数）を計算する手法を提案する．まず我々は，虚時間発展する波動関数の規格化定数が分配関数になることに注目し，この規格化定数を，複数の波動関数の overlap を使って系統的に求める手法を構築した．我々の手法では，仮に虚時間発展が正しく行われたとして, $\mathrm{Tr}[\hat{\rho}_{\rm th}^2]$ を計測することができれば，外挿法を用いることなく自由エネルギーの直接計算が可能である．我々の手法では，N 量子ビットの状態の分配関数を求める際に $2N$ 量子ビットを使用すればよい．そのため, 従来手法よりも必要な量子ビットの数が節約できる点に大きな特徴がある．さらにこの手法を Heisenberg 模型に適用して数値計算を行った結果，スピン数 2 の Heisenberg 模型の分配関数が高精度に求められることを確認した．

本論文は以下のような構成になっている．2 章では，変分量子シミュレーションによる虚時間発展のレビューを行う．3 章では，我々の提案した変分量子シミュレーションを用いた分配関数の計算方法について説明する．4 章では我々の手法の数値計算によるシミュレーション結果について述べる．5 章では，本研究のまとめを行う．

2. 変分量子シミュレーションによる波動関数の虚時間発展

変分原理を用いて量子状態の虚時間発展をシミュレートする手法 [15] のレビューを行う．ハミルトニアン $\hat{H}$ のもとでの波動関数の虚時間発展は次の方程式に従う：

$$-\frac{\partial}{\partial\tau}|\psi(\tau)\rangle = (\hat{H} - E_\tau)|\psi(\tau)\rangle, \tag{4}$$

$$E(\tau) = \langle\psi(\tau)|\hat{H}|\psi(\tau)\rangle. \tag{5}$$

この方程式の解は形式的に

$$|\psi(\tau)\rangle = \frac{1}{\sqrt{A(\tau)}}\exp(-\hat{H}\tau)|\psi(0)\rangle \tag{6}$$

と書ける．ここで，$A(\tau) = \langle\psi(0)|e^{-2\hat{H}\tau}|\psi(0)\rangle$，$A(0) = 1$ である．また，プランク定数 $\hbar$ とボルツマン定数 $k_{\rm B}$ が $\hbar = k_{\rm B} = 1$ となる自然単位系を採用する．非ユニタリ発展である虚時間発展演算子 $\exp(-\hat{H}\tau)$ を量子回路で直接再現することはできないが，ユニタリー演算子 $\hat{V}(\vec{\theta}(\tau))$ を用いて表現される試行状態（ansatz）$|\phi(\vec{\theta}(\tau))\rangle = \hat{V}(\vec{\theta}(\tau))|\phi(\vec{\theta}(0))\rangle$ で $|\psi(\tau)\rangle$ を近似する：$|\phi(\vec{\theta}(\tau))\rangle \simeq |\psi(\tau)\rangle$．ここで，ユニタリ演算子 $\hat{V}(\vec{\theta}(\tau))$ は d 個のパラメータ化されたユニタリ演算子 $\hat{U}_1(\theta_1(\tau)), \cdots, \hat{U}_d(\theta_d(\tau))$ により $\hat{V}(\vec{\theta}(\tau)) = \hat{U}_d(\theta_d(\tau))\cdots\hat{U}_1(\theta_1(\tau))$ のように構成されている．また，初期状態 $|\phi(\vec{\theta}(0))\rangle$ は $|\psi(0)\rangle$ と一致するようにとる：$|\phi(\vec{\theta}(0))\rangle = |\psi(0)\rangle$．

次に虚時間発展を実現させる $\vec{\theta}(\tau)$ を計算する方法を紹介する．これは虚時間発展方程式 (4) を，McLachlan の変分原理 [28] を用いて近似的に解くことに帰着する．まず，虚時間発展方程式 (4) と ansatz $|\phi(\vec{\theta}(\tau))\rangle$ を用いて，次の McLachlan の変分汎関数を定義する：

$$J = \|(\partial/\partial\tau + \hat{H} - E_\tau)|\phi(\vec{\theta}(\tau))\rangle\|^2, \tag{7}$$

$$E(\tau) = \langle\phi(\vec{\theta}(\tau))|\hat{H}|\phi(\vec{\theta}(\tau))\rangle. \tag{8}$$

この汎関数が $\||\phi(\vec{\theta}(\tau))\rangle\| = 1$ の下で最小となる条件

$$\delta\|(\partial/\partial\tau + \hat{H} - E_\tau)|\phi(\vec{\theta}(\tau))\rangle\| \geq 0 \tag{9}$$

から，$\vec{\theta}(\tau)$ の虚時間発展を記述する微分方程式を得ることができる：

$$\sum_{q=1}^{d} M_{pq}\frac{\partial\theta_q}{\partial\tau} = C_p. \tag{10}$$

ここで

$$M_{pq} = \mathrm{Re}\left(\frac{\partial\langle\phi(\vec{\theta}(\tau))|}{\partial\theta_p}\frac{\partial|\phi(\vec{\theta}(\tau))\rangle}{\partial\theta_q}\right), \tag{11}$$

$$C_p = -\mathrm{Re}\left(\frac{\partial\langle\phi(\vec{\theta}(\tau))|}{\partial\theta_p}\hat{H}|\phi(\vec{\theta}(\tau))\rangle\right) \tag{12}$$

であり，M は $d \times d$ 行列，$\vec{C} \in \mathbb{R}^d$ である．(10) から $\partial\vec{\theta}(\tau)/\partial\tau = M^{-1}(\tau)\vec{C}(\tau)$ となるから, τ の微小変化 $\tau + \Delta\tau$ を考えると，次式を得る：

$$\begin{aligned}\vec{\theta}(\tau+\Delta\tau) &\simeq \vec{\theta}(\tau) + \frac{\partial\vec{\theta}(\tau)}{\partial\tau}\Delta\tau \\ &= \vec{\theta}(\tau) + M^{-1}(\tau)\vec{C}(\tau)\Delta\tau.\end{aligned} \tag{13}$$

上式 (13) からパラメータ $\vec{\theta}(\tau)$ を逐次的に更新していくことで，各 τ に対して $|\phi(\vec{\theta}(\tau))\rangle$ が求められる．

行列 M とベクトル $\vec{C}$ は量子回路と古典コンピュータを組み合わせることで計算できる．$\hat{V}(\vec{\theta}(\tau))$ 構成する p 番目のユニタリ演算子 $\hat{U}_p(\theta_p)$ の導関数が

$$\frac{\partial\hat{U}_p(\theta_p)}{\partial\theta_p} = \sum_k f_{k,p}\hat{U}_p(\theta_p)\hat{u}_{k,p} \tag{14}$$

と記述できると仮定する．ここで，$\hat{u}_{k,p}$ はユニタリ演算子,

$f_{k,p}$ は係数である．例えば, p 番目のユニタリ演算子 $\hat{U}_p(\theta_p)$ が 1 量子ビットの回転演算子 $R_y(\theta_p) = \exp(-i\theta_p\hat{\sigma}_y/2)$ のとき，$\partial R_y(\theta_p)/\partial\theta_p = -i/2\hat{\sigma}_y R_y(\theta_p)$ となる．このとき，$f_{k=1,p} = -i/2$，$\hat{u}_{k=1,p} = \hat{\sigma}_y$ とおくことで $\partial R_y(\theta_p)/\partial\theta_p$ を (14) で表すことができる．次に，p 番目のユニタリ演算子 $\hat{U}_p(\theta_p)$ が制御回転演算子 $CR_y(\theta_p)$ のとき,

$$\frac{\partial CR_y(\theta_p)}{\partial\theta_p} = -\frac{i}{2}\left|1\right\rangle\left\langle 1\right| \otimes \{R_y(\theta_p)\hat{\sigma}_y\} \tag{15}$$

$$= -\frac{i}{4}CR_y(\theta_p)\{\hat{I}\otimes\hat{\sigma}_y\} + \frac{i}{4}CR_y(\theta_p)\{\hat{\sigma}_z\otimes\hat{\sigma}_y\} \tag{16}$$

となる．ここで, $\hat{I}$ は恒等演算子である．このとき, $f_{k=1,p} = -i/4$，$f_{k=2,p} = i/4$，$\hat{u}_{k=1,p} = \hat{I}\otimes\hat{\sigma}_y$，$\hat{u}_{k=2,p} = \hat{\sigma}_z\otimes\hat{\sigma}_y$ とおくことで $\partial CR_y(\theta_p)/\partial\theta_p$ を (14) で表すことができる．したがって,

$$\frac{\partial\left|\phi(\vec{\theta}(\tau))\right\rangle}{\partial\theta_p} = \sum_k f_{k,p}\tilde{V}_{k,p}\left|\phi(0)\right\rangle, \tag{17}$$

$$\frac{\partial\left\langle\phi(\vec{\theta}(\tau))\right|}{\partial\theta_p} = \sum_k f^*_{k,p}\left\langle\phi(0)\right|\tilde{V}^\dagger_{k,p} \tag{18}$$

と書ける．ここで

$$\tilde{V}_{k,p} = \hat{U}_d(\theta_d)\ldots\hat{U}_{i+1}(\theta_{p+1})\hat{U}_p(\theta_i)\hat{u}_{k,p}\ldots\hat{U}_1(\theta_1) \tag{19}$$

$$\tilde{V}^\dagger_{k,p} = \hat{U}^\dagger_1(\theta_1)\ldots\hat{U}^\dagger_{p-1}(\theta_{p-1})\hat{u}^\dagger_{k,p}\hat{U}^\dagger_p(\theta_p)\ldots\hat{U}^\dagger_d(\theta_d) \tag{20}$$

とおいた．したがって係数 M_{pq} と C_p はそれぞれ，(11) と (12)，(17) と (18) から,

$$M_{pq} = \sum_{k,l}\mathrm{Re}\left(f^*_{k,p}f_{l,q}\left\langle\phi(\vec{\theta}(0))\right|\tilde{V}^\dagger_{k,p}\tilde{V}_{l,q}\left|\phi(\vec{\theta}(0))\right\rangle\right) \tag{21}$$

$$C_p = \sum_{k,l}\mathrm{Re}\left(f^*_{k,p}\lambda_l\left\langle\phi(\vec{\theta}(0))\right|\tilde{V}^\dagger_{k,p}\hat{P}_l\hat{V}\left|\phi(\vec{\theta}(0))\right\rangle\right) \tag{22}$$

となる．ここで，N 量子ビット系のハミルトニアン $\hat{H}$ がパウリ演算子のテンソル積 $\hat{P}_l$ を用いて，$\hat{H} = \sum_l \lambda_l\hat{P}_l$ と分解できることを用いた．展開係数 λ_l は $\lambda_l = \frac{1}{2^N}\mathrm{Tr}[\hat{P}_l\hat{H}]$ である．実際には期待値は NISQ で求め，定数倍や和をとる操作は古典コンピュータで実行することになる．

3. 分配関数の計算方法

我々は，任意のハミルトニアンの分配関数を計算する方法を提案する．注目する N 量子ビット系を A，そのコピーとなる補助量子系を B とする．そして，系 A と系 B を合わせた全 $2N$ 量子ビット系のハミルトニアンを $\hat{H} = \hat{H}_\mathrm{A}\otimes\hat{I}_\mathrm{B}$ とする．ここで，$\hat{H}_\mathrm{A}$，$\hat{I}_\mathrm{B}$ はそれぞれ系 A と系 B に作用する演算子であり，$\hat{I}_\mathrm{B}$ は恒等演算子である．

先行研究 [14] により，最大エンタングルメント状態を初期状態として虚時間発展をすることで，Gibbs 状態が生成されることが知られている．初期状態として，最大エンタングルド状態 $\left|\phi(0)\right\rangle = (1/\sqrt{2^N})\sum_{i=0}^{2^N-1}\left|i\right\rangle_\mathrm{A}\left|i\right\rangle_\mathrm{B}$ を用意する．そのために，変分量子回路の初期状態が

$$\left|\phi(\vec{\theta}(0))\right\rangle = \hat{V}(\vec{\theta}(0))\left|0\right\rangle^{\otimes 2N} = \frac{1}{\sqrt{2^N}}\sum_{i=0}^{2^N-1}\left|i\right\rangle_\mathrm{A}\left|i\right\rangle_\mathrm{B} \tag{23}$$

を満たすように，初期パラメータ $\vec{\theta}(0)$ を設定する．ここで，$\left|0\right\rangle$ はパウリ演算子 $\hat{\sigma}_z$ の固有値 $+1$ に対応する固有状態である．

初期状態 (23) をハミルトニアン $\hat{H} = \hat{H}_\mathrm{A}\otimes\hat{I}_\mathrm{B}$ に従って虚時間発展させた波動関数の規格化定数 $A(\tau)$ は

$$A(\tau) = \langle\psi(0)|e^{-2\hat{H}_\mathrm{A}\tau}|\psi(0)\rangle = \frac{1}{2^N}\sum_{i,j=0}^{2^N-1}\langle i|e^{-2\hat{H}_\mathrm{A}\tau}|j\rangle_\mathrm{A}\,\delta_{i,j} = Z(2\tau)/2^N \tag{24}$$

となる．ここで，$Z(2\tau)$ はハミルトニアンの分配関数であり次のように記述される：

$$Z(2\tau) = \mathrm{Tr}_\mathrm{A}[e^{-2\hat{H}_\mathrm{A}\tau}] = \sum_{i=0}^{2^N-1}\langle i|e^{-2\hat{H}_\mathrm{A}\tau}|i\rangle_\mathrm{A}. \tag{25}$$

さらに，形式的に 2τ を逆温度 $\beta = 1/T$ と置き換えることで

$$Z(\beta) = 2^N A(\beta/2) \tag{26}$$

を得る．つまり，虚時間発展する波動関数の規格化定数 $A(\tau)$ から，分配関数が求まることがわかる．

しかしながら，$A(\tau)$ を量子回路で直接求めることはできない．そこで我々は，量子回路で計測が可能な波動関数間の overlap $D(\tau,\tau')$ から，$A(\tau)$ を求める手法を提案する．$D(\tau,\tau')$ の定義および $A(\tau)$ との関係は以下のように記述される：

$$D(\tau,\tau') = |\left\langle\psi(\tau)|\psi(\tau')\right\rangle|^2 = \frac{A^2((\tau+\tau')/2)}{A(\tau)A(\tau')}. \tag{27}$$

この overlap は $\hat{V}^\dagger(\tau')\hat{V}(\tau)|0\rangle$ を量子回路で準備して, $|0\rangle\langle 0|$ へ射影される確率を計測することで求めることができる．

さらに式 (27) を変形して,

$$A(\tau) = \frac{A^2((\tau+\tau')/2)}{D(\tau,\tau')A(\tau')} \tag{28}$$

を得る．次に，上式 (28) において，$\tau = n\Delta\tau$，$\tau' = (n-2)\Delta\tau$，$(n\geq 2)$ すると

$$A(n\Delta\tau) = \frac{A^2((n-1)\Delta\tau)}{D(n\Delta\tau,(n-2)\Delta\tau)A((n-2)\Delta\tau)} \quad (29)$$

となる．すると $A(n\Delta\tau)$ は次のように，逐次的に求めることができる：

$$\frac{A(2\Delta\tau)}{A(\Delta\tau)} = \frac{A(\Delta\tau)}{D(2\Delta\tau,0)A(0)},$$

$$\frac{A(3\Delta\tau)}{A(2\Delta\tau)} = \frac{A(2\Delta\tau)}{D(3\Delta\tau,\Delta\tau)A(\Delta\tau)},$$

$$\vdots$$

$$\frac{A(n\Delta\tau)}{A((n-1)\Delta\tau)} = \frac{A((n-1)\Delta\tau)}{D(n\Delta\tau,(n-2)\Delta\tau)A((n-2)\Delta\tau)}.$$

これらをまとめることで次式を得る：

$$A(n\Delta\tau) = \frac{A((n-1)\Delta\tau)A(\Delta\tau)}{D(n\Delta\tau,(n-2)\Delta\tau)\cdots D(2\Delta\tau,0)}. \quad (30)$$

ここで，$D(n\Delta\tau,(n-2)\Delta\tau),\ldots,D(2\Delta\tau,0)$ は量子回路から求めることが可能であるため，初期値に対応する $A(\Delta\tau)$ を古典計算機などで得ることができれば，$A(n\Delta\tau)$ が任意の n に対して計算することが可能になる．我々は，この手法を RFM(Recurrence Formula Method) と名付ける．また，初期値 $A(\Delta\tau)$ は $\Delta\tau$ が十分小さい場合，Tayler 展開を用いて

$$A(\Delta\tau) = \langle\psi(0)|e^{-2\hat{H}\Delta\tau}|\psi(0)\rangle$$

$$\simeq 1 - 2\Delta\tau\langle\psi(0)|\hat{H}|\psi(0)\rangle + \cdots \quad (31)$$

と記述できるため，古典計算機を用いて近似的に計算が可能である．しかしながらこの手法では，より低温での分配関数を求めるために，より多くの overlap を NISQ で計測して，その積を求める必要がある．そのため，低温側の分配関数を求める際に，実験的に求めた overlap が真の値からずれていると，そのエラーが蓄積してしまうことが予想される．ゆえに，このアプローチは比較的高温側の分配関数を求める際に有効であると考えられる．

そこで我々は，低温側の分配関数を求める際に特に有効であると考えられる別のアプローチを提案する．任意のハミルトニアン $\hat{H} = \hat{H}_{\rm A}\otimes\hat{I}_{\rm B}$ のエネルギー固有状態 $\{|\phi_i\rangle\}_{i=0}^{2^N-1}$ で初期状態 $|\psi(0)\rangle$ を展開した表示では

$$\langle\psi(0)|e^{-\hat{H}(\tau+\tau')}|\psi(0)\rangle = \sum_{i=0}^{2^N-1}|a_i(0)|^2e^{-E_i(\tau+\tau')} \quad (32)$$

となる．ここで，$\{E_i\}_{i=0}^{2^N-1}$ はエネルギー固有値，$\{a_i(0)=\langle\phi_i|\psi(0)\rangle\}_{i=0}^{2^N-1}$ は展開係数である．ここで我々は，一般性を失うことなく $E_i\le E_{i+1}$，$(i=0,1,\cdots,2^N-2)$ を仮定できる．この表式を使うことで overrap は，

$$D(\tau,\tau') = |\langle\psi(\tau)|\psi(\tau')\rangle|^2 = \frac{\langle\psi(0)|e^{-\hat{H}(\tau+\tau')}|\psi(0)\rangle}{A(\tau)A(\tau')}$$

$$= \frac{e^{-2E_0(\tau+\tau')}}{A(\tau)A(\tau')}\left|\left[m|a_0(0)|^2 + \sum_{i=m}^{2^N-1}|a_i(0)|^2e^{-(E_i-E_0)(\tau+\tau')}\right]\right|^2 \quad (33)$$

と書ける．ここで，m は系 A の基底状態の縮退度を表し，$a_0(0)=a_1(0)=\cdots=a_{m-1}(0)$ となる．上式において τ' に十分大きな値である τ'_∞ を採用すれば，$m|a_0(0)|^2 \gg |(\sum_{i=m}^{2^N-1}|a_i(0)|^2e^{-(E_i-E_0)(\tau+\tau'_\infty)})|^2$ が満たされるので，

$$D(\tau,\tau'_\infty) \simeq \frac{m^2}{A(\tau)A(\tau'_\infty)}e^{-2E_0(\tau+\tau'_\infty)}|a_0(0)|^4 \quad (34)$$

となる．詳しくは後述するが，τ'_∞ の決定の仕方は，虚時間発展を NISQ デバイスで行いエネルギーの期待値が収束する時間を用いる．ここで，

$$1 = D(\tau'_\infty,\tau'_\infty) \simeq \frac{m^2}{A^2(\tau'_\infty)}e^{-4E_0\tau'_\infty}|a_0(0)|^4 \quad (35)$$

より

$$A(\tau'_\infty) \simeq me^{-2E_0\tau'_\infty}|a_0(0)|^2 \quad (36)$$

を (34) へ代入すると，

$$A(\tau) \simeq \frac{m}{D(\tau,\tau'_\infty)}e^{-2E_0\tau}|a_0(0)|^2 \quad (37)$$

を得る．さらに，$|a_0(0)|^2 = 1/2^N$ であることを利用すると，$Z(2\tau)=2^NA(\tau)$ となるため

$$Z(2\tau) \simeq \frac{m}{D(\tau,\tau'_\infty)}e^{-2E_0\tau} \quad (38)$$

を得る．これは，系 A のハミルトニアンの分配関数となる．我々は，この手法を ROM(Reversed Overlap Method) と名付ける．ただし，注目系の量子ビット数 N が大きく，かつ高温の極限の分配関数を計算する際には，overlap の計測に多くの時間がかかるために，ROM の手法をこの領域に適用できない点には注意が必要である．また，この手法で分配関数を計算するためには，基底状態の縮退度 m を求める必要がある．虚時間発展により得られた状態に関して，補助系 B について，トレースアウトした $\hat{\rho}(\tau'_\infty)={\rm Tr}_{\rm B}[|\psi(\tau'_\infty)\rangle\langle\psi(\tau'_\infty)|]$ の purity ${\rm Tr}[\hat{\rho}(\tau'_\infty)^2]$ を量子回路により計算することで，縮退度 m を求めることができる．縮退度 m と purity ${\rm Tr}[\hat{\rho}(\tau'_\infty)^2]$ には $m=1/{\rm Tr}[\hat{\rho}(\tau'_\infty)^2]$ という関係がある．ここでは，purity ${\rm Tr}[\hat{\rho}(\tau'_\infty)^2]$ は，Destructive SWAP test という NISQ アルゴリズムによって求める (詳細な計算は A.1 を参照)．また ROM の方法では, RFM の場合と異なり, Destructive SWAP test を用いて縮退度 m を求めるために, 必要な量子ビット数は $4N$ となる．

4. シミュレーション結果

我々の手法の性能を数値計算により評価する．我々は，Heisenberg 模型のハミルトニアンである

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^{N-1} J(\hat{\sigma}_x^{(i)}\hat{\sigma}_x^{(i+1)} + \hat{\sigma}_y^{(i)}\hat{\sigma}_y^{(i+1)} + \hat{\sigma}_z^{(i)}\hat{\sigma}_z^{(i+1)}) \quad (39)$$

を考え，数値シミュレーションを行った．ここで，$\hat{\sigma}_\alpha^{(k)}$, $(\alpha = x, y, z)$ は k 番目の量子ビットに作用する Pauli 演算子，J は量子ビット間の結合定数，N は量子ビットの数を，それぞれ表す．ハミルトニアン (39) は注目系 A のハミルトニアンであり，添え字 A は省略した．本論文では，$J > 0$ と $J < 0$，$N = 2$ の場合の数値計算を行う． ここで，$J > 0$ の場合は基底状態が $|00\rangle$，$\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$，$|11\rangle$ であり，縮退をする．一方で，$J < 0$ の場合は基底状態が $\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)$ であり，縮退はない．変分量子シミュレーションに用いた ansatz と，変分量子回路の各パラメータの初期値 $\vec{\theta}(0)$ を図 1 に示す．まず，虚時間発展を行った際のエネルギー（ハミルトニアンの期待値）の振る舞いをプロットした（図 2）．時間を大きくすることで，基底エネルギーに漸近していくことが確認できた．$4\tau J$ が 10 付近で十分に基底状態に漸近していることがわかるため，我々は $\tau'_\infty = 2.5/J$ を選ぶ．また，変分量子シミュレーションにより虚時間発展法を行うことで得た近似的な波動関数 $|\phi(\vec{\theta}(\tau))\rangle$ と，厳密解 $|\psi(\tau)\rangle$ との間の忠実度 $F(|\phi(\vec{\theta}(\tau))\rangle, |\psi(\tau)\rangle) = |\langle\phi(\vec{\theta}(\tau))|\psi(\tau)\rangle|^2$ を数値計算により求めた．その結果を図 3 に示す．我々の変分量子シミュレーションにより，高精度で波動関数を再現できたことがわかる．

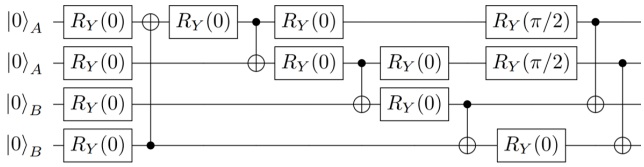

図 1 我々が用いた 4 量子ビットの ansatz．2 量子ビットの注目系（A）と，2 量子ビットの補助量子ビット系（B）から構成される．$|0\rangle_A$ と $|0\rangle_B$ はそれぞれ，系 A と系 B の量子ビットを表す．ゲート中の引数は，パラメータの初期値 $\vec{\theta}(0)$ を表す．

次に虚時間発展法を用いて分配関数を求め，自由エネルギーを計算した．その結果について説明する．図 4(a), (b) と図 5(a), (b) に我々の手法で求めた自由エネルギーの振る舞いをを示す．図 4(図 5) は，Heisenberg 模型のハミルトニアンのパラメータを $J > 0 (J < 0)$ とした場合の結果を示している．我々の手法によって求めた分配関数から，高精度に自由エネルギーを計算できていることがわかる．3 章で述べたように，RFM で分配関数を求める場合，高温側のほうが，量子コンピューターで overlap を計算する回数が少なくてすみ，エラーの蓄積を避けられる．実際，

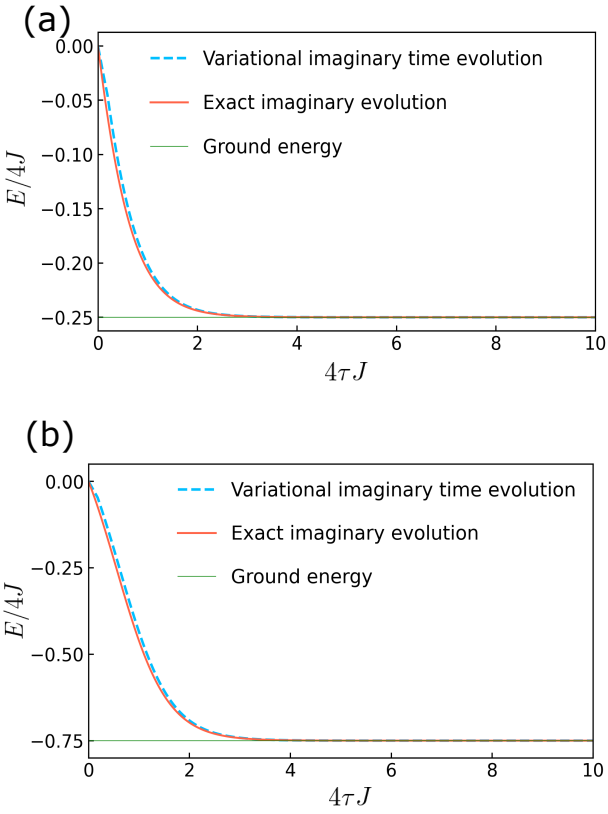

図 2 変分量子シミュレーションにより虚時間発展法を実行した際のエネルギー．ハイゼンベルク模型を採用して，虚時間 τ に対して，ハミルトニアンの期待値をプロットしている．青い点線が変分原理による虚時間発展の結果を，赤い実線が解析的に虚時間発展を行った結果を，それぞれ表している．また，緑の実線は基底エネルギーを表す．(a) では結合定数を $J > 0$ としており，この場合は基底状態が縮退する．(b) では $J < 0$ としており，この場合は基底状態は縮退しない．

図 4，図 5 からわかるように，高温側の分配関数を求める RFM で得られた自由エネルギーがより厳密解に近いことがわかる．

5. まとめ

本研究では，NISQ デバイスを用いた変分原理による虚時間発展法から，自由エネルギーを求める新手法を提案した．具体的には，量子回路で計測可能な Gibbs 状態間の overlap を用いて分配関数が計算可能であることを示した．そして，数値シミュレーションの結果，我々の手法によって求めた分配関数から，高精度に自由エネルギーを計算できることがわかった．我々の研究は，NISQ デバイスの新たな応用先を開拓する．

謝辞：本研究は，文部科学省の卓越研究員事業の支援とさきがけ JPMJPR1919 の助成，産業技術総合研究所 Nanotech CUPAL の支援を受けた．本講演で発表した研究は，国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) の委託業務 (JPNP16007) の結果得られたも

ⓒ 2021 Information Processing Society of Japan

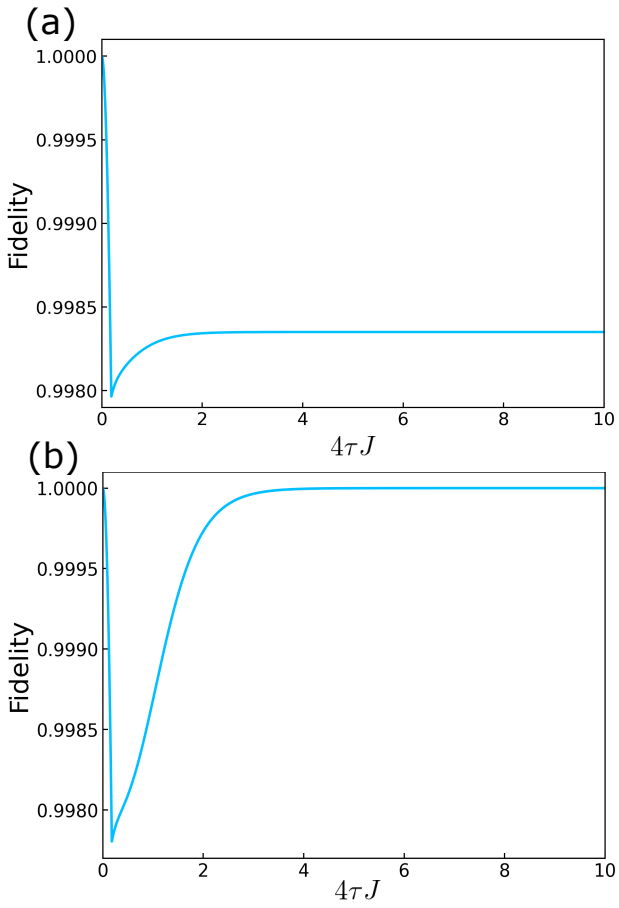

図 3 変分量子シミュレーションによる虚時間発展法で得た近似的な波動関数と厳密解との間の忠実度．ハミルトニアンとしてはハイゼンベルク模型を採用し，虚時間 τ に対して，忠実度をプロットしている．(a) は結合定数を $J > 0$ を，(b) は $J < 0$ を，それぞれ選んでいる．

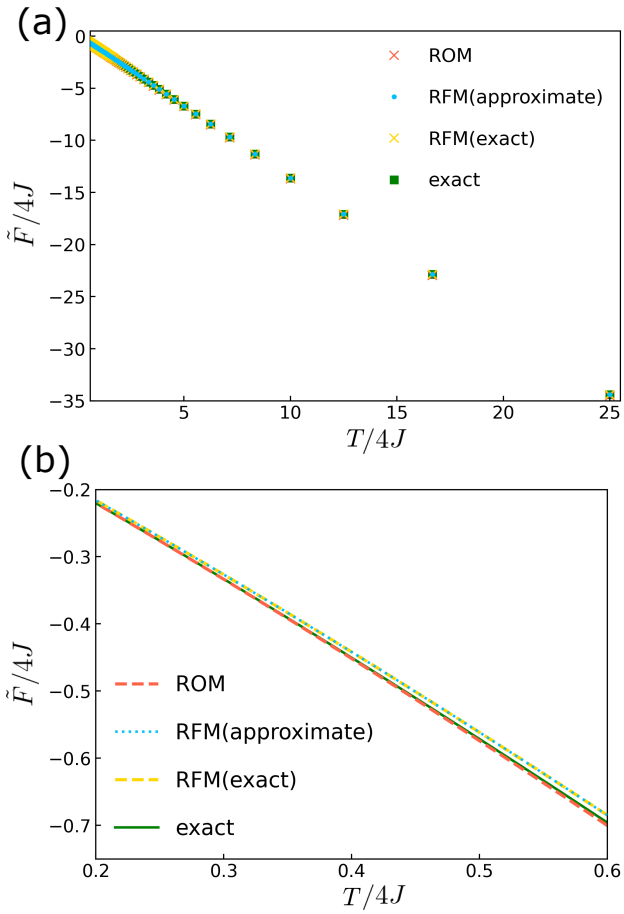

図 4 虚時間発展法による自由エネルギーの計算結果．ハイゼンベルク模型の自由エネルギーを，温度に対してプロットしている．赤色のプロットが ROM による数値解を，青色のプロットが分配関数の初期値に対して Tayler 展開を 4 次まで行った場合の RFM による数値解を，黄色のプロットが厳密に与えられた分配関数の初期値を用いた場合の RMF による数値解を，緑色の実線が解析解を，それぞれ表している．パラメータとしては $J > 0$ を採用し，(a) は $0 < T/4J < 25$ の領域を，(b) は $0.2 < T/4J < 0.6$ の領域を，それぞれプロットしている．

のである．

付　　録

A.1 Destructive SWAP test

ここでは，異なる 2 つの密度行列の overlap を計算する Destructive SWAP test という NISQ アルゴリズムについてレビューを行う [29–31]．L qubit からなる C 系と，それとは別に L qubit からなる D 系とを用意する．Destructive SWAP test とは，異なる 2 つの密度行列 $\hat{\rho}_{\mathrm{C}}$, $\hat{\sigma}_{\mathrm{D}}$ を用いて，後述するオブザーバブル $\bigotimes_{i=1}^{L} \hat{M}_i$ を測定することにより，$\mathrm{Tr}[\hat{\rho}_{\mathrm{C}}\hat{\sigma}_{\mathrm{C}}]$ を得るアルゴリズムである：

$$\mathrm{Tr}\left[(\bigotimes_{i=1}^{L}\hat{M}_i)(\hat{\rho}_{\mathrm{C}}\otimes\hat{\sigma}_{\mathrm{D}})\right] = \mathrm{Tr}[\hat{\rho}_{\mathrm{C}}\hat{\sigma}_{\mathrm{C}}]. \tag{A.1}$$

ここで，$\hat{\sigma}_{\mathrm{C}}$ や $\hat{\sigma}_{\mathrm{D}}$ はパウリ演算子ではなく密度行列を表すことに注意が必要である．オブザーバブル $\hat{M}_n$ は系 C の n 番目の量子ビットと系 D の n 番目の量子ビット間に非局所的に作用する演算子であり，次のように表すことができる：

$$\hat{M}_n = \hat{P}_1^{(n)} + \hat{P}_2^{(n)} + \hat{P}_3^{(n)} - \hat{P}_4^{(n)} \tag{A.2}$$

ここで，$\{\hat{P}_i^{(n)}\}_{i=1,2,3,4}$ は Bell 基底への射影演算子を表している：

$$\hat{P}_1^{(n)} = |\psi^+\rangle\langle\psi^+|,\ \hat{P}_2^{(n)} = |\psi^-\rangle\langle\psi^-|,$$

$$\hat{P}_3^{(n)} = |\phi^+\rangle\langle\phi^+|,\ \hat{P}_4^{(n)} = |\phi^-\rangle\langle\phi^-| \tag{A.3}$$

ここで，Bell 基底は

$$|\psi^{\pm}\rangle = \frac{1}{2}(|00\rangle_n \pm |11\rangle_n) \tag{A.4}$$

$$|\phi^{\pm}\rangle = \frac{1}{2}(|01\rangle_n \pm |10\rangle_n) \tag{A.5}$$

と定義され，$|00\rangle_n$, $|01\rangle_n$, $|10\rangle_n$, $|11\rangle_n$ は，系 C と系 D の n 番目の量子ビットの状態を表している．また，Destructive SWAP test は，図 A·1 に示す量子回路により実行するこ

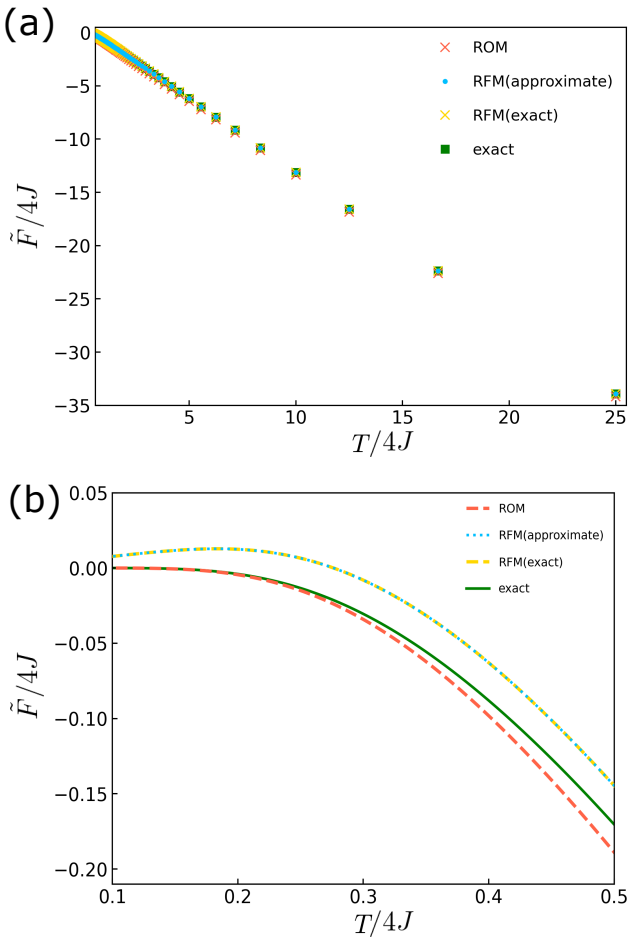

図 5 虚時間発展法による自由エネルギーの計算結果．ハイゼンベルク模型の自由エネルギーを，温度に対してプロットしている．赤色のプロットが ROM による数値解を，青色のプロットが分配関数の初期値に対して Tayler 展開を 4 次まで行った場合の RFM による数値解を，黄色のプロットが厳密に与えられた分配関数の初期値を用いた場合の RMF による数値解を，緑色の実線が解析解を，それぞれ表している．パラメータとしては $J < 0$ を採用し，(a) は $0 < T/4J < 25$ の領域を，(b) は $0.1 < T/4J < 0.5$ の領域を，それぞれプロットしている．

とができる．まず系 C と系 D の，1 番目の量子ビットの間，2 番目の量子ビットの間，$\cdots$，L 番目の量子ビットの間に，それぞれ制御 NOT ゲートを印可する．次に，$\hat{\rho}_{\mathrm{C}}$ のすべての量子ビットにアダマールゲート H を適用してから，$\hat{\sigma}_z$ の基底で測定することで，Bell 測定を実行できる．その際に，$\hat{P}_1^{(n)}$, $\hat{P}_2^{(n)}$, $\hat{P}_3^{(n)}$ のいずれかへの射影が起こった場合は $+1$ を，$\hat{P}_4^{(n)}$ へ射影が起こった場合は -1 を記録していくことを，すべての n に関して行うことで，オブザーバブル $\bigotimes_{i=1}^{L} \hat{M}_i$ の測定が可能になる．我々は，上で説明したプロセスを繰り返し実行し，測定結果の平均値を求めることで，$\mathrm{Tr}[\hat{\rho}_{\mathrm{C}}\hat{\sigma}_{\mathrm{C}}]$ を求めることができる．3 章でも説明したが，我々は，縮退度を求めるために Destructive SWAP test を用いた．

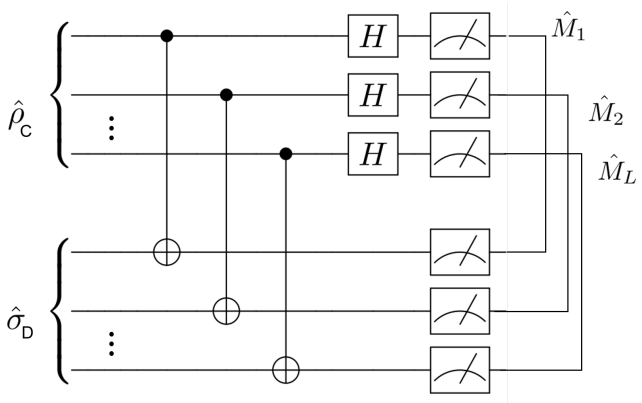

図 A·1 Destructive SWAP を実行する量子回路．

参考文献

[1] R. P. Feynman, *Statistical Mechanics: A Set Of Lectures*. CRC Press, 1998.

[2] S. Endo, Z. Cai, S. C. Benjamin, and X. Yuan, "Hybrid quantum-classical algorithms and quantum error mitigation," *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 90, no. 3, p. 032001, 2021.

[3] S. McArdle, S. Endo, A. Aspuru-Guzik, S. C. Benjamin, and X. Yuan, "Quantum computational chemistry," *Reviews of Modern Physics*, vol. 92, no. 1, p. 015003, 2020.

[4] Y. Cao, J. Romero, J. P. Olson, M. Degroote, P. D. Johnson, M. Kieferová, I. D. Kivlichan, T. Menke, B. Peropadre, N. P. Sawaya, *et al.*, "Quantum chemistry in the age of quantum computing," *Chemical reviews*, vol. 119, no. 19, pp. 10856–10915, 2019.

[5] K. Mitarai, M. Negoro, M. Kitagawa, and K. Fujii, "Quantum circuit learning," *Physical Review A*, vol. 98, no. 3, p. 032309, 2018.

[6] M. Benedetti, D. Garcia-Pintos, O. Perdomo, V. Leyton-Ortega, Y. Nam, and A. Perdomo-Ortiz, "A generative modeling approach for benchmarking and training shallow quantum circuits," *npj Quantum Information*, vol. 5, no. 1, pp. 1–9, 2019.

[7] J. Preskill, "Quantum computing in the nisq era and beyond," *Quantum*, vol. 2, p. 79, 2018.

[8] A. Peruzzo, J. McClean, P. Shadbolt, M.-H. Yung, X.-Q. Zhou, P. J. Love, A. Aspuru-Guzik, and J. L. O'brien, "A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor," *Nature communications*, vol. 5, no. 1, pp. 1–7, 2014.

[9] A. Kandala, A. Mezzacapo, K. Temme, M. Takita, M. Brink, J. M. Chow, and J. M. Gambetta, "Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets," *Nature*, vol. 549, no. 7671, pp. 242–246, 2017.

[10] N. Moll, P. Barkoutsos, L. S. Bishop, J. M. Chow, A. Cross, D. J. Egger, S. Filipp, A. Fuhrer, J. M. Gambetta, M. Ganzhorn, *et al.*, "Quantum optimization using variational algorithms on near-term quantum devices," *Quantum Science and Technology*, vol. 3, no. 3, p. 030503, 2018.

[11] J. R. McClean, J. Romero, R. Babbush, and A. Aspuru-Guzik, "The theory of variational hybrid quantum-classical algorithms," *New Journal of Physics*, vol. 18, no. 2, p. 023023, 2016.

[12] E. Farhi, J. Goldstone, and S. Gutmann, "A quantum approximate optimization algorithm," *arXiv preprint arXiv:1411.4028*, 2014.

ⓒ 2021 Information Processing Society of Japan

[13] Y. Li and S. C. Benjamin, "Efficient variational quantum simulator incorporating active error minimization," *Physical Review X*, vol. 7, no. 2, p. 021050, 2017.
[14] X. Yuan, S. Endo, Q. Zhao, Y. Li, and S. C. Benjamin, "Theory of variational quantum simulation," *Quantum*, vol. 3, p. 191, 2019.
[15] S. McArdle, T. Jones, S. Endo, Y. Li, S. C. Benjamin, and X. Yuan, "Variational ansatz-based quantum simulation of imaginary time evolution," *npj Quantum Information*, vol. 5, no. 1, pp. 1–6, 2019.
[16] J. Wu and T. H. Hsieh, "Variational thermal quantum simulation via thermofield double states," *Physical review letters*, vol. 123, no. 22, p. 220502, 2019.
[17] A. N. Chowdhury, G. H. Low, and N. Wiebe, "A variational quantum algorithm for preparing quantum gibbs states," *arXiv preprint arXiv:2002.00055*, 2020.
[18] Y. Wang, G. Li, and X. Wang, "Variational quantum gibbs state preparation with a truncated taylor series," *arXiv preprint arXiv:2005.08797*, 2020.
[19] K. C. Tan, D. Bowmick, and P. Sengupta, "Quantum stochastic series expansion methods," *arXiv preprint arXiv:2010.00949*, 2020.
[20] M. Motta, C. Sun, A. T. Tan, M. J. O' Rourke, E. Ye, A. J. Minnich, F. G. Brandão, and G. K.-L. Chan, "Determining eigenstates and thermal states on a quantum computer using quantum imaginary time evolution," *Nature Physics*, vol. 16, no. 2, pp. 205–210, 2020.
[21] A. Francis, D. Zhu, C. H. Alderete, S. Johri, X. Xiao, J. K. Freericks, C. Monroe, N. M. Linke, and A. F. Kemper, "Many body thermodynamics on quantum computers via partition function zeros," *arXiv preprint arXiv:2009.04648*, 2020.
[22] G. Harsha, T. M. Henderson, and G. E. Scuseria, "Wave function methods for canonical ensemble thermal averages in correlated many-fermion systems," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 153, no. 12, p. 124115, 2020.
[23] J. Cohn, F. Yang, K. Najafi, B. Jones, and J. K. Freericks, "Minimal effective gibbs ansatz: A simple protocol for extracting an accurate thermal representation for quantum simulation," *Physical Review A*, vol. 102, no. 2, p. 022622, 2020.
[24] L. Bassman, K. Klymko, N. M. Tubman, and W. A. de Jong, "Computing free energies with fluctuation relations on quantum computers," *arXiv preprint arXiv:2103.09846*, 2021.
[25] K. Życzkowski, "Rényi extrapolation of shannon entropy," *Open Systems & Information Dynamics*, vol. 10, no. 03, pp. 297–310, 2003.
[26] M. Fannes and N. Van Ryn, "Connecting the von neumann and rényi entropies for fermions," *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 45, no. 38, p. 385003, 2012.
[27] S. Johri, D. S. Steiger, and M. Troyer, "Entanglement spectroscopy on a quantum computer," *Physical Review B*, vol. 96, no. 19, p. 195136, 2017.
[28] A. McLachlan, "A variational solution of the time-dependent schrodinger equation," *Molecular Physics*, vol. 8, no. 1, pp. 39–44, 1964.
[29] A. K. Ekert, C. M. Alves, D. K. Oi, M. Horodecki, P. Horodecki, and L. C. Kwek, "Direct estimations of linear and nonlinear functionals of a quantum state," *Physical review letters*, vol. 88, no. 21, p. 217901, 2002.
[30] J. C. Garcia-Escartin and P. Chamorro-Posada, "Swap test and hong-ou-mandel effect are equivalent," *Physical Review A*, vol. 87, no. 5, p. 052330, 2013.
[31] L. Cincio, Y. Subaşı, A. T. Sornborger, and P. J. Coles, "Learning the quantum algorithm for state overlap," *New Journal of Physics*, vol. 20, no. 11, p. 113022, 2018.

ⓒ 2021 Information Processing Society of Japan