

第 66 回物性若手夏の学校・集中ゼミ講義ノート： Noisy Intermediate-Scale Quantum デバイスを用いた 物性シミュレーションの可能性

株式会社 QunaSys 中川裕也

概要

Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ) デバイスと呼ばれる量子デバイスが登場し、その実用化へ向けて様々な研究開発が行われている。この集中ゼミでは、NISQ デバイスをどのように物性物理学の計算に活用していくのか、基礎から最前線の話までを概観する。

1 イントロダクション

昨今、一般のニュースでも量子コンピュータという言葉が耳にする機会が増えてきた。量子コンピュータは量子力学の法則を活用した計算装置であり、特定の問題に対しては従来の古典コンピュータを遥かに凌駕する計算能力を持つ。長年にわたる研究開発の結果、量子コンピュータの“卵”とも呼べる Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ) デバイスと呼ばれる装置が、実験室レベルを越えて商用機として利用可能になりつつある。そして、量子コンピュータに限らず量子技術全般が世界中で次世代の重要技術として位置づけられ、産官学の様々なレベルで多数のプロジェクトが立ち上がっている。^{*1}

この集中ゼミでは、近い将来の実用化が期待されている NISQ デバイスを用いた物性物理学の理論計算（物性シミュレーション）について紹介する。なぜ NISQ デバイスや量子コンピュータと物性物理学の問題が相性がいいと考えられているのかや、どのような手法によって物性シミュレーションを行うことが提案されているかを学んでいく。さらに、最前線の研究テーマを議論することで、NISQ デバイスによる物性シミュレーションが本当に古典コンピュータを上回ることができるのか、それを達成するにはどのような研究開発が必要になるのか、参加者の方々と議論を深めていきたい。

2 量子コンピュータ開発の歴史と現在地（非専門家の視点から）

まず本節では、NISQ デバイスという概念がなぜ登場したかを知るために、量子コンピュータ開発の歴史と現状を紹介する。筆者は量子コンピュータに関する研究の経験が浅く、また歴史の専門家でもないため、本集中ゼミに必要な最小限の記述に留める。^{*2}

量子コンピュータ開発の歴史

量子コンピュータのアイデア自体は古く、1981 年に Feynman が「自然をシミュレーションしたければ、量子力学の原理でコンピュータを作らなくてはならない」と述べて基礎概念を提案している [2]。1985 年に Deutsch によって量子コンピュータの定式化が提唱された後 [3]、1994 年に Shor によって素因数分解

^{*1} Quantum Science and Technology, Volume 4, Number 2, April 2019 に世界各国・地域の取り組みのレビューがある。

^{*2} 2000 年頃までの歴史に関しては Nielsen-Chuang の教科書 [1] の各章末に詳しいレビューがある。また、非専門家向けの本「驚異の量子コンピュータ 宇宙最強マシンへの挑戦」(藤井啓祐著、岩波書店)には近年の発展も含めた経緯が平易に述べられている。

を高速に実行する量子アルゴリズムが提案された [4, 5]。素因数分解の困難性は現在の暗号技術の根幹となる概念であり、量子コンピュータが実現した際の社会への大きなインパクトが示唆されたことから、量子コンピュータが非常に注目されることとなった。同時期に Shor と Steane による誤り訂正の理論 [6, 7] も提案され、量子コンピュータの実現が理論的に現実味を帯びたこともあり、量子コンピュータのハードウェア開発も進展していった。

しかし 2010 年代初頭までは 1 か 2 量子ビット程度の実験的な実現が多く、量子ビット数や演算精度は大きくは改善しなかった。ブレークスルーとなったのは、2014 年にカリフォルニア大学サンタバーバラ校の Martinis らが非常に高精度な超伝導量子ビットの作成に成功したことである [8]。5 量子ビットのデバイスではあるが、その演算精度は一定の条件下で量子誤り訂正を実行するのに必要な閾値を上回っており、集積化を行えば実際に誤り耐性量子コンピュータを実現できる期待を持たせるものだった。その結果、直後にアメリカの民間企業 Google による Martinis グループの買収が発表され、アカデミアだけでなく民間企業も商用ベースでの量子コンピュータの作成を目指すようになった。現在では Google だけではなく IBM や Honeywell といった大企業や、Rigetti computing や IonQ といったベンチャー企業が量子コンピュータ開発に参入しており、量子コンピュータの産業応用を目指して様々なプレーヤーが研究開発を進めている。

量子誤り訂正と NISQ デバイス

量子誤り訂正は、量子コンピュータを実現するための重要な技術的障壁であり、NISQ デバイスという概念にも深く関わっている。量子コンピュータも物理系である以上、外界からの様々なノイズを受ける。現在広く用いられている古典コンピュータにはノイズがあっても正しく動作するように様々な工夫がなされているが、これと同様に量子コンピュータに対するノイズの影響の除去を行うのが量子誤り訂正である。次節で見ると量子情報は複素数で記述されるアナログな情報であることから、量子誤り訂正の実現は困難で量子コンピュータは動作しないと批判する研究者もいたが [9]、1995 年に Shor と Steane によって独立に量子誤り訂正手法が考案された [6, 7]。補助的な量子ビットと守りたい量子ビットをエンタングルさせ、一部の量子ビットに測定と適切なフィードバックをかけることで、元の量子ビットの情報を保護する量子誤り訂正を行えることがわかった。以降、エラーモデルや実装方法などに様々な改良を加えながら、量子誤り訂正理論の研究が続けられている。^{*3}

先述したように、2014 年の Martinis らによる実験論文では量子誤り訂正理論（の一種）の閾値を上回る高精度な量子ビットが実現された。しかし、実際に必要な量子ビット数の多さとフィードバック制御の難しさから、未だにスケラブル（集積化可能）な形での量子誤り訂正デバイスの開発はされていない。このような状況の中、2018 年に Preskill が名付けた **Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ) デバイス** [11] というデバイスが本集中ゼミの主題である。NISQ デバイスの定義は、

- 量子誤り訂正機能がない (Noisy)
- 中規模 (Intermediate-Scale) = 数十個～千個程度の
- 量子ビットを持つ

デバイスである。誤り訂正機能がないということは、計算途中にノイズ（エラー）が入っても訂正されず、理想的な結果を得ることはできないということである。そのため、多数の演算からなる量子計算は実行できず、例えば素因数分解や連立方程式の求解といった複雑なアルゴリズムの実行は現実的に難しい。それでも、エラー確率が十分に低ければ、比較的少数の演算のみを用いて何らかの意味のある計算を実行できるかもしれない、というのが NISQ デバイスの主旨である。実際、50 個を超えるような量子ビットを持つデバイスは古典コンピュータで完璧にシミュレーションすることが現実的に不可能であり、すでに特定の問

^{*3} 現在では特に、surface code（物性物理学という toric code 模型）を用いた量子誤り訂正スキームが注目されている。例えば [10] を参照。

題において古典コンピュータを上回る“計算”デバイスであることが示されている [12]。そうした NISQ デバイスの応用先として特に有望なのが物性シミュレーションであり、第 4 節で詳しく紹介する。

3 量子計算の基礎

量子コンピュータは、量子計算を行う装置である。この節では、量子コンピュータを理解するために必要な量子計算の基礎について学ぶ。ここでは物理学者・理論化学者を念頭に、量子計算を理解するのに必要最低限な知識のみを学んでいくが、計算機科学的な様々な計算モデルや厳密な定義を用いた議論に触れたい方は、適当な教科書やレビュー論文を参照してほしい。^{*4}

3.1 量子ビット

量子コンピュータでの情報処理の単位は量子ビット (qubit) で、1 つの量子ビットは **2 準位の量子力学系**である。その基底 (固有状態) を $|0\rangle, |1\rangle$ と書くこととすると、1 量子ビットの純粋状態^{*5}は

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (1)$$

と 2 つの複素数 $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ で表すことができる。つまり数学的には「2 次元の複素数係数ヒルベルト空間 \mathbb{C}^2 の元」ということになる。 n 個の量子ビットを表す空間は 1 量子ビットの空間の n 個のテンソル積であり、その純粋状態は

$$|\psi\rangle = \sum_{i_0, \dots, i_{n-1}=0,1} \psi_{i_0 \dots i_{n-1}} |i_0 \dots i_{n-1}\rangle \quad (2)$$

と書ける。ここで、 $|i_0 \dots i_{n-1}\rangle = |i_0\rangle \otimes \dots \otimes |i_{n-1}\rangle$ のようにテンソル積記号を略記した。注目したいのは、 n 量子ビット状態が $\psi_{i_0 \dots i_{n-1}}$ という 2^n 個の状態振幅 (複素数) で記述されることである。量子ビットの数に対して**指数的に振幅の数が増える**ことと、その振幅が複素数であり**干渉 (打ち消し合いや強め合い) を起こす**ことが、量子コンピュータが古典コンピュータを上回る計算能力を持つ要因だと考えられている。

なお、 n 量子ビットの状態を古典コンピュータで完全に再現したいのであれば、 2^n 個の複素数をメモリに確保して計算を行う必要がある。 $n = 10$ や 20 であればこれはラップトップ PC でも実行できるくらい容易だが、 $n = 50$ ともなると 2^{50} 個の複素数を保持する必要があり、倍精度を使うとおよそ $128 \text{ bit} \times 2^{50} \approx 18$ ペタバイトものメモリを必要とする。この意味で、現実的には $n \gtrsim 50$ 個の量子ビットを持つ系の古典シミュレーションは非常に難しく、この性質が NISQ デバイス応用の意義を考える上で重要になってくる。

3.2 量子ゲート

量子計算において、量子ビットの状態を制御する操作 (演算) が量子ゲートである。量子力学によると、量子状態に対する操作は一般にユニタリ操作でなければならないので、量子ゲートはユニタリ行列で表される。

ゲートの例

まずは代表的なゲートの例を見てみよう。

^{*4} 例えば「量子計算理論 量子コンピュータの原理」(森前智行著、森北出版)。

^{*5} 量子系の状態には純粋状態以外に混合状態と呼ばれるものもあるが、このテキストでは説明は省略する。

■1 量子ビットゲート 1量子ビットに作用するゲートは最も基本的なゲートである。パウリゲート X, Y, Z は

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

と定義される。ここで行列表示は基底 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ に対してのものであり、ブラケット記法であらわに書けば $X = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|$ 等となる。パウリゲートの重要な性質として

$$\begin{aligned} \text{Tr}(X) = \text{Tr}(Y) = \text{Tr}(Z) = 0, X^2 = Y^2 = Z^2 = I, \\ XY = -YX = iZ, YZ = -ZY = iX, ZX = -XZ = iY, \end{aligned}$$

があり、非常によく使うので覚えておいて損はない。他にはアダマールゲート H (ハミルトニアンと混同しないように注意)、 S ゲート、 T ゲートがよく用いられる。

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}, T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

■2 量子ビットゲート 2量子ビットに作用するゲートの例としては制御 NOT ゲート (controlled-NOT、CNOT)・制御 Z ゲート (CZ) がある。CNOT と CZ は制御ゲートと呼ばれる種類のゲートである。一般に n 量子ビットに作用する制御ゲートは、1つの制御量子ビット c と $n-1$ 個の対象量子ビット t の二つを持ち、 $n-1$ 量子ビットゲート U に対して

$$\Lambda_{c,t}(U) = |0\rangle_c \langle 0|_c \otimes I + |1\rangle_c \langle 1|_c \otimes U \quad (5)$$

と定義される。つまり、制御量子ビットが $|1\rangle$ のときのみ対象量子ビットに U が作用するようなゲートである。CNOT は $U = X$ (X ゲートはビットの反転操作)、CZ は $U = Z$ とした制御ゲートで、あらわに書くと

$$\text{CNOT} = \Lambda(X) = |0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes X, \text{CZ} = \Lambda(Z) = |0\rangle\langle 0| \otimes I + |1\rangle\langle 1| \otimes Z \quad (6)$$

となる。

■ n 量子ビットゲート n 量子ビットに対するパウリゲートは、どの量子ビットに作用するかの添字 $i = 0, \dots, n-1$ を用いて

$$P = P_0 \otimes \dots \otimes P_{n-1} =: P_0 P_1 \dots P_{n-1} \quad (7)$$

と書く。ここで $P_i \in \{I, X, Y, Z\}$ である。しばしば恒等演算子 I が作用する部分は省略され、例えば $X_0 Y_1 Z_3$ は $X_0 \otimes Y_1 \otimes I_2 \otimes Z_3$ を表す。1量子ビットの時と同様に、 n 量子ビットに対するパウリゲートも $P^2 = I$ を満たす。

■パウリ回転ゲート 量子計算アルゴリズムを学ぶ際に頻出するのが、パウリ回転ゲートである。特にNISQ デバイスを用いる際には、パウリ回転ゲートの回転角をパラメータとする量子回路を考えることが殆どである。パウリ回転ゲートはパウリゲートを生成子とする回転演算子で、1量子ビットの場合は

$$R_X(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}X} = \cos\frac{\theta}{2} \cdot I - i\sin\frac{\theta}{2} \cdot X = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -i\sin\frac{\theta}{2} \\ -i\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (8)$$

となる。^{*6} n 量子ビットパウリゲート P に対しても同様に回転ゲートが

$$e^{-i\frac{\theta}{2}P} = \cos\frac{\theta}{2} \cdot I - i\sin\frac{\theta}{2} \cdot P \quad (9)$$

と定義される。

^{*6} $X^2 = Y^2 = Z^2 = I$ を使って行列の指数関数を簡単にしている。同様に $R_Y(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}Y}$, $R_Z(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}Z}$ も定義される。

ユニバーサルゲートセット

n 量子ビット系の操作には $2^n \times 2^n$ のユニタリ行列 U が対応する。連続無限個の種類がある任意の U を実装するには無限個のゲートを用意しなければならないのだろうか？興味深いことに、適当な条件を満たす**有限個のゲート**を多数組み合わせることで、任意の U を所望の精度で近似できることがわかっている [1]。例えば $\{H, T, \text{CNOT}\}$ という組が条件を満たすことが知られている。つまり、これらの3種類のゲートの実装方法を用意しておけば、どのようなユニタリ操作も（十分な高精度で）実行可能となるのである。このようなゲートの組のことをユニバーサルゲートセットと呼ぶ。

3.3 測定

単に量子状態を用意して操作をただけでは計算結果を取り出すことはできず、必ず測定という行為が必要になる。ここでは、全ての量子ビットを射影測定するという最も簡単な場合のみを紹介する。 n 量子ビットの状態 $|\psi\rangle$ に対して、0番目から $n-1$ 番目のビットに対する射影測定を行うと、 n 個の古典ビットからなる測定結果 “ $j_0 j_1 \cdots j_{n-1}$ ” を

$$|\langle j_0 j_1 \cdots j_{n-1} | \psi \rangle|^2 \quad (10)$$

の確率で得る ($j_0, \dots, j_{n-1} = 0, 1$)。そして測定後の状態は

$$|j_0 j_1 \cdots j_{n-1}\rangle \quad (11)$$

に変化する。この測定の法則の意味するところは二つある。一つ目は、量子状態を用意・操作して測定を行ったとしても、一般には確率的な結果しか得られない点である。高確率で所望の答えや計算結果を得るためには、量子アルゴリズムを用いてうまく確率を増幅させる工夫が必要になる。二つ目は、測定によって量子状態が変化してしまう点である。この点が、単なる状態の観測によってエラー発生を検出・復元できないという量子誤り訂正の難しさに影響している。

3.4 量子回路図

論理回路図・電気回路図のように、量子回路（量子ゲートの列）についてもある程度標準化されている図示方法が存在する。量子回路図は一般に以下のような形をしている。

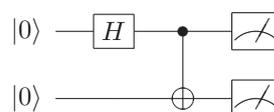


図1 量子回路図の例。

主な構成要素は

- 量子ビット：回路図の1つ1つの横線が、それぞれ1つの量子ビットに対応している。左端の $|0\rangle$ は、それぞれの量子ビットが $|0\rangle$ に初期化されていることを表す。
- 量子ゲート：回路図内の四角い箱や縦線が、量子ゲートを表す。一般に、 n 量子ビットゲートは作用する n 個の量子ビット（横線）にまたがる箱で表される。それ以外に特殊な書き方で表すゲートがいくつかあり、例えば CNOT ゲートは上図の左から二番目の黒丸と白丸の縦線で表される。
- 測定：右端にあるメーターのような記号で、量子ビットに対する測定を行うことを表す。

回路図は左から右に読む。つまり、楽譜のように図の左から順に量子ゲートや測定操作を行うことで計算が進んでいく。図1の回路は、 $\Lambda_{0,1}(X)H_0|00\rangle$ という状態を作った後、全ての量子ビットを測定する行為を表す。

4 変分量子アルゴリズムを用いた物性シミュレーション

この節では、本集中ゼミの主題である NISQ デバイスの物性シミュレーションへの応用を述べる。まず NISQ デバイスにおけるノイズの大きさを見積もり、変分量子アルゴリズム [13] という手法がなぜ重要なのか解説する。次に物性シミュレーションという問題を定義し、代表的な変分量子アルゴリズムである Variational Quantum Eigensolver (VQE) [14] を紹介する。最後に、VQE に関する研究課題を紹介する。

4.1 なぜ変分量子アルゴリズムなのか？

NISQ デバイスには誤り訂正機能がなく、計算実行中に生じたノイズの影響がそのまま蓄積されるため、複雑な量子回路を実行することが難しい。この言説が意味するところを具体的に見てみよう。2量子ビットゲートの忠実度（所望の状態の再現度）が99.9%であったとき、1次元的に並んだ n 量子ビットの隣り合う量子ビット間に2量子ビットゲートを作用させ、それを m 層繰り返すとしよう*7。2量子ビットゲートの総数は nm 個だから、量子回路の出力状態の波動関数に対して理想的な結果が占める部分はざっと $p = (99.9\%)^{nm}$ である。例として $n = m = 50$ を代入すると、 $p = 8\%$ という小さな値になってしまう。このように、NISQ デバイスでは比較的少数の量子ビット数でも（忠実度次第ではあるが）ほぼ理想的な出力が得られなくなってしまう。古典アルゴリズムよりも高速だと信じられている素因数分解などの量子アルゴリズムでは、量子回路そのものが多数の量子ゲートから構成されていて、さらに多数の補助ビットを利用するのが一般的なため、古典コンピュータで解けないほどの大きなサイズの問題を NISQ デバイスを用いて解くのは難しいと考えられている。

変分量子アルゴリズムは、そのようなノイズが不可避である NISQ デバイスを活用するために提唱された考え方である。変分パラメータを持った量子状態を NISQ デバイス上に生成し、測定によって何らかの出力を得る。そしてその出力が望んだ結果になるように、変分パラメータを古典コンピュータで最適化していくのである。変分量子アルゴリズムの利点と欠点として次が挙げられる：

- 量子状態を生成する回路が浅くても問題ない場合は、ノイズがあったとしても意味のある計算結果が得られるかもしれない。特に、**現実的に NISQ デバイス上にしか再現できないような大きな量子状態を考える場合**、古典コンピュータでは実行困難な計算を行えていることになる（3.1節参照）。
- 変分的な考え方に基づいているため、**アルゴリズムの精度や計算時間に理論的な保証をつけることが難しい**。

以降では、変分量子アルゴリズムの具体例として Variational Quantum Eigensolver (VQE) を紹介する。

4.2 物性シミュレーション

VQE の説明に入る前に、計算対象とする物性シミュレーションの定義をしておこう。

一般に量子コンピュータが扱うのが得意なのは、**格子に定義された第二量子化ハミルトニアン**で表される量子多体系の問題である。なぜかというと、量子コンピュータの情報処理の単位が量子ビットという離散的なものであるため、やはり格子に離散的な自由度で定義された模型を自然に扱えるからである。さ

*7 現在の NISQ デバイスでは1量子ビットゲートの精度は2量子ビットゲートのそれに比べて高いので無視した。また簡単のため、測定エラーや量子ビットの寿命なども無視した。

らにハミルトニアンが第二量子化演算子で書かれていれば、それを自然に量子ビット上の演算子として定義できるので、問題を量子コンピュータに適した形に変換する必要がない。例えば、 n サイトの $S = 1/2$ ハイゼンベルグ鎖を考えてみよう。

$$H = \sum_{i=0}^{n-1} (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + S_i^z S_{i+1}^z). \quad (12)$$

1量子ビットは1つの $S = 1/2$ スピン自由度と等価であるので、この系はそのまま n 量子ビットで扱うことができる。スピン演算子 S^x, S^y, S^z とパウリゲート X, Y, Z は $S^x = \frac{1}{2}X, S^y = \frac{1}{2}Y, S^z = \frac{1}{2}Z$ と単純な比例関係にあるから、 H を量子ビット上の演算子で表しても相互作用の locality を変化させることはない。 $S = 1$ 以上のスピン系の場合は、複数の qubit を組み合わせて一つのスピンを表すことになる ($S = 3/2$ (4準位系) なら2量子ビット)。また電子系の場合は、Jordan-Wigner 変換・Parity 変換・Bravyi-Kitaev 変換といった手法で系を $S = 1/2$ スピン系に変換してから、量子ビット系として扱うことになる。こうした場合は、元々の系が持っていた相互作用の locality を変化させることがある。

この集中ゼミで物性シミュレーションと呼ぶ問題は、こうした n 量子ビット系で定義された第二量子化ハミルトニアンの固有値を求めることや、その時間発展を解くことを指す。3.1節で論じたように、 n が大きくなると n 量子ビットの状態を厳密に古典コンピュータでシミュレートするのは現実的に難しい。 n 量子ビット系のハミルトニアンは $2^n \times 2^n$ という巨大なサイズの行列であり、その固有値を求めたりダイナミクスを厳密に扱うのはやはり $n = 30$ から 50 が限界となる。次小節で見ると、NISQ デバイスを用いれば n が十分大きい場合でも (精度はともかく) 物性シミュレーション問題に取り組むことが可能になる。よって、NISQ デバイスはこれまで数値計算で満足に扱えてこなかったサイズの物性物理学の問題に対する新たなアプローチとなりうる。この点で、物性シミュレーションは NISQ デバイスの応用可能先として最も注目されているのである。

4.3 Variational Quantum Eigensolver (VQE)

物性シミュレーション (特に、ハミルトニアンの固有値・固有状態を求める問題) を NISQ デバイスで行う手法の中でも、VQE [14] は最もよく研究されている。VQE が基礎としているのは、量子力学における Ritz の変分原理である：

Ritz の変分原理 パラメータ $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_M)$ でパラメトライズされた n 量子ビット状態の族 $\{|\psi(\theta)\rangle\}_\theta$ とハミルトニアン H を考える。このとき、期待値 $E(\theta) = \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle$ は次の不等式を満たす：

$$E(\theta) \geq E_0. \quad (13)$$

ここで E_0 は H の基底状態エネルギーである。また、 $E(\theta)$ を最小にするような θ^* が見つかったとすると、 $|\psi(\theta^*)\rangle$ は H の基底状態 $|E_0\rangle$ に最も近い状態 ($|\langle \psi(\theta^*) | E_0 \rangle|$ が最大) であり、 $\langle \psi(\theta^*) | H | \psi(\theta^*) \rangle$ は H の基底状態エネルギー E_0 の近似値となる。特に $\{|\psi(\theta)\rangle\}_\theta$ に $|E_0\rangle$ が含まれるときは、上記の不等式で等号が成立し、 $|\psi(\theta^*)\rangle = |E_0\rangle$ となる。

以上を踏まえつつ、VQE の手順を具体的に紹介すると次の通りである。

- ステップ 1. まず、変分量子状態 (試行波動関数や ansatz と呼ばれる) $|\psi(\theta)\rangle$ を設定する。
- ステップ 2. NISQ デバイスを用いて、期待値 $E(\theta) = \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle$ を測定する。必要に応じて、勾配 $\frac{\partial E(\theta)}{\partial \theta}$ も測定する。
- ステップ 3. 期待値 $E(\theta)$ (とその勾配) の情報を用いて、 $E(\theta)$ が小さくなるように θ を更新する。
- ステップ 4. ステップ 1-3 を繰り返して、 $E(\theta)$ の値が収束したらアルゴリズムを終了する。

各ステップの中身を詳細に見ていこう。まずステップ1では、系についての物理的直感や個々のNISQデバイスの特性を勘案して ansatz をどのような関数形にするかを設定する。現在のNISQデバイスでは、パラメータ化されたゲートとして1量子ビットのパウリ回転 $R_{X,Y,Z}(\theta)$ が用意されているものが多い。そのため一般的に、CNOTなどのパラメータを含まないゲート U_1, \dots, U_{M+1} と、回転角がパラメータであるパウリ回転ゲート $e^{-i\frac{\theta_1}{2}P_1}, \dots, e^{-i\frac{\theta_M}{2}P_M}$ を使った

$$|\psi(\theta)\rangle = U_1 e^{-i\frac{\theta_1}{2}P_1} U_2 e^{-i\frac{\theta_2}{2}P_2} \dots U_M e^{-i\frac{\theta_M}{2}P_M} U_{M+1} |0\dots 0\rangle \quad (14)$$

という ansatz が用いられている。ここで P_1, \dots, P_M は n 量子ビット上のパウリゲートである。^{*8} 具体的にどのような ansatz が用いられているかについては次小節で詳しく述べる。

ステップ2では、NISQデバイス上に生成した変分量子状態 $|\psi(\theta)\rangle$ に対して、ハミルトニアン H の期待値 $\langle\psi(\theta)|H|\psi(\theta)\rangle$ を測定する。ここで、NISQデバイスは量子ビットの基底 $\{|0\dots 0\rangle, \dots, |1\dots 1\rangle\}$ (計算基底と呼ばれる) でしか測定を行えないことに注意する。量子力学の入門書で習うような、 H のエネルギー固有状態 $|E_0\rangle, |E_1\rangle, \dots$ での射影測定が行えないのである。^{*9} よって、 H の期待値は次のように測定する。まず、ハミルトニアン H を n 量子ビットのパウリ行列 (ゲート) で $H = \sum_{k=1}^R c_k P_k$ と展開する。 n 量子ビットのパウリ行列は 4^n 通り存在し、 n 量子ビット上のエルミート演算子がなす線型空間の基底をなしているから、 H は必ず実数係数 c_k で展開が可能である。そして、各パウリ行列 P_k の期待値をNISQデバイスを用いて次のように測定する：

- もし P_k が I と Z の積のみで構成されている場合は、そのまま計算基底での測定を行う。この場合は計算基底は P_k の固有状態だから、「 $|\psi(\theta)\rangle$ の生成 → 測定」を多数繰り返し、観測された固有値の統計平均をとることで期待値を推定する。例えば1量子ビットパウリ行列 Z の固有状態 $|0\rangle (|1\rangle)$ の固有値は $1 (-1)$ だから、1量子ビット状態 $|\psi\rangle$ を計算基底で100回測定して0が30回・1が70回得られた場合は、 $\langle\psi|Z|\psi\rangle = \frac{30-70}{100} = -0.4$ と期待値を推定する。
- P_k の中に X と Y があれば、 $X = HZH, Y = SHZHS^\dagger$ という関係を利用して、適宜 H と HS^\dagger を $|\psi(\theta)\rangle$ にかけることで P_k を I と Z のみからなるパウリ行列 P'_k に変換する。こうすれば、計算基底での測定で期待値を求めることができる。例えば2量子ビット系の $P_k = Z_0 X_1$ というパウリ行列の期待値を測るときは、 $|\psi(\theta)\rangle$ に H_1 をかけたあとに $P'_k = Z_0 Z_1$ の期待値を測れば良い： $\langle\psi(\theta)|Z_0 X_1|\psi(\theta)\rangle = \langle\psi(\theta)|H_1 \cdot Z_0 Z_1 \cdot H_1|\psi(\theta)\rangle$ 。

このように得た期待値 $\langle\psi(\theta)|P_k|\psi(\theta)\rangle$ を古典コンピュータ上で足し合わせることにより、 $\langle\psi(\theta)|H|\psi(\theta)\rangle = \sum_{k=1}^R c_k \langle\psi(\theta)|P_k|\psi(\theta)\rangle$ を得るのである。

ステップ3では、測定された期待値 $E(\theta)$ やその勾配 $\frac{\partial E(\theta)}{\partial \theta}$ の情報を元に、古典コンピュータを用いて θ を更新する。例えば単純な勾配法では $\theta' \leftarrow \theta - \eta \frac{\partial E(\theta)}{\partial \theta}$ と更新して、 $E(\theta)$ が小さくなるようにする ($\eta > 0$ は更新率)。勾配をどのように測定するかは次小節で紹介する。

最後にステップ4では、更新前後での $E(\theta)$ の値を比較し、もし値が十分収束していれば (最小化が完了していれば) アルゴリズムを終了する。

以上がVQEの具体的な実行手順である。なお、ここでは基底状態に関するアルゴリズムを紹介したが、変分法的に H の励起状態を求めるアルゴリズムも多数提案されている [15, 16, 17, 18]。

^{*8} 1量子ビットのパウリ回転ゲート $R_Z(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}Z}$ があれば、 $2m-2$ 個のCNOTを用いることで m 量子ビットのパウリゲート $Z_0 \dots Z_m$ による回転ゲート $e^{-i\frac{\theta}{2}Z_0 \dots Z_m}$ を構成することができる [1]。 m 量子ビットパウリゲートの中に X, Y が含まれるときは、 $X = HZH, Y = SHZHS^\dagger$ の関係式を用いて適宜1量子ビットゲート H, HS^\dagger を挿入すればよい。

^{*9} 実質的にエネルギー固有状態での射影測定を行うのが量子位相推定アルゴリズム ([1] の5章参照) と呼ばれるアルゴリズムであるが、これは e^{iHt} という時間発展演算子を制御量子ビット付きで実行する複雑な量子回路を必要とし、NISQデバイスでの実行は現実的ではない。

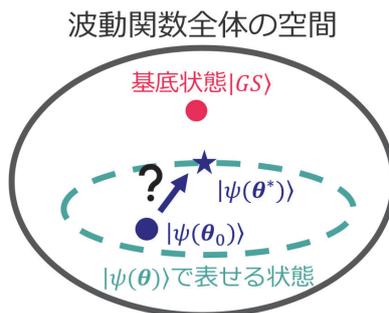


図2 VQEにおける ansatz とその最適化に関する概念図。

4.4 VQE に関する研究テーマ

VQE が有効に機能するためには、次のような条件が必要だと考えられる（他にも多数あると思うが、一部を挙げる）：

- ansatz が十分な表現能力を持ち H の基底状態 $|GS\rangle$ を高精度に近似できる（図2の“ $|\psi(\theta)\rangle$ ”で表せる状態”が $|GS\rangle$ を含むか十分近い状態を持つ）。
- 適切な初期値 θ_0 から出発して、 $E(\theta)$ を最小化する θ^* を効率よく見つけることができる（図2の矢印）。
- 測定揺らぎやノイズの影響があっても正確な期待値 $E(\theta)$ が得られる。

これらは全て VQE に関する重要な研究テーマである。このテキストでは最初の2つを取り上げる。

テーマ1：ansatz をどう選ぶ？

第一のテーマは、VQE に用いる ansatz をどのように設定するかという問題である。ハミルトニアン H の基底状態やそのエネルギーを高精度に計算するには、ansatz の表現能力はなるべく高い方が良い。一方、NISQ デバイスでの計算中に発生するノイズを考えると、高い表現能力を持つような複雑な量子回路を使いたくはない。ここでは、これまでの研究で用いられてきたいくつか ansatz の例を紹介してみる。

■**Hardware-efficient type ansatz** 実際の NISQ デバイスを用いた実験でよく用いられているのが hardware-efficient type ansatz と呼ばれる ansatz (HE ansatz) である [19]。HE ansatz の厳密な定義はなく、NISQ デバイスのハードウェアに即した量子回路構造になっていれば HE ansatz と呼ばれるようだが、典型的な構成としては以下の図3のような量子回路がある。この回路は (1) 1量子ビットパウリ回転ゲート（パラメータ付き）と2量子ビットゲート CZ のみからなる (2) 2量子ビットゲート CZ は隣接した量子ビット間のみ作用する、という特徴を持つ。これらの特徴は、実際の NISQ デバイスで ansatz を実装した時に2量子ビットゲートを削減することに寄与する。超伝導量子ビットからなる NISQ デバイスの場合、デバイス上で空間的に隣接している量子ビット間には直接2量子ビットゲートを作用させることができるが、隣接していない量子ビット間の2量子ビットゲートはそれぞれに隣接した量子ビットを多数経由して間接的に実行することになる。ゆえに隣接するビット間のみ2量子ビットゲートを使う回路構造にすることで、NISQ デバイス上で実装した時の2量子ビットゲートの総数を抑えることができる。4.1節で述べたように NISQ デバイスではノイズの大きな2量子ビットゲートの数を削減することが重要であり、HE ansatz の回路構造は NISQ デバイスでの実行精度を最大限高めることを意識した構造と言える。

HE ansatz はいわばハードウェアの都合を優先して定義された ansatz であり、ハミルトニアン H に関

する物理的な知識を用いていないため、量子ビット数 n が 8 から 10 程度の系になると多数のパラメータが必要になったり精度が悪くなったりする傾向にあるようである（著者の私見）。

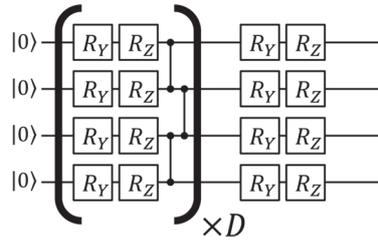


図 3 Hardware-efficient type ansatz の量子回路図。各回転ゲート R_Y, R_Z は独立なパラメータ $\theta_1, \theta_2, \dots$ を持ち、この構造が D 回繰り返される。

■Symmetry-preserving ansatz HE ansatz の local さを保ちつつも、物理的な意味を考えてもう少し制限したヒルベルト空間内を探索するパラメトライズを試みたのが symmetry-preserving ansatz と呼ばれる種類の ansatz である [20, 21]。量子回路としては図 4 のように、 $|\psi_0\rangle$ という初期状態に対して、 $A(\theta, \phi)$ という 2 量子ビットゲートを隣接する量子ビット間に作用させ、その層を多数重ねた構造をしている。 $A(\theta, \phi)$ の成分をあらわに書くと

$$A(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & e^{i\phi} \sin \theta & 0 \\ 0 & e^{-i\phi} \sin \theta & -\cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (15)$$

となり、 $\{|01\rangle, |10\rangle\}$ 間でしか遷移がないことがわかる。そのため、この ansatz では波動関数に含まれる計算基底 $|j_0 \dots j_{n-1}\rangle$ の “1” ビットの総数 $j_0 + \dots + j_{n-1}$ を一定に保つことができる。つまり、スピンス系であれば全スピンの z 成分 S_{tot}^z を一定に保ったまま、Jordan-Wigner 変換を用いた電子系であれば全粒子数を一定に保ったまま、状態を変化させていくことができる。物性物理で扱うモデルの大半では S_{tot}^z や全粒子数が保存されているから、 $|\psi_0\rangle$ を適切にとることで、これらの保存量に関する特定の対称性セクター内の状態を symmetry-preserving ansatz で効率よく探索できることになる。

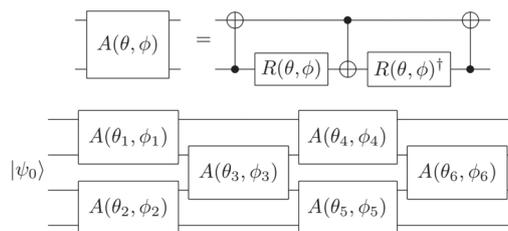


図 4 （上）2 量子ビットゲート $A(\theta, \phi)$ の定義。ここで $R(\theta, \phi) = R_Z(\phi + \pi)R_Y(\theta + \pi/2)$ である。
（下） $n = 4$ 量子ビットに対する depth=2 の symmetry-preserving ansatz の量子回路図。

■Variational Hamiltonian ansatz 最後に Variational Hamiltonian ansatz (VH ansatz) と呼ばれる ansatz を紹介する [22]。ハミルトニアンが $H = \sum_{k=1}^R c_k P_k$ と R 個のパウリ行列の和で書けるとき、VH ansatz は

$$U(\theta) := \prod_{m=1}^D \left(\prod_{k=1}^R e^{i\theta_k^{(m)} P_k} \right) \quad (16)$$

という量子回路で定義される。 D は回路の深さを決めるパラメータで、回路パラメータの総数は DR 個である。例えば、2 サイトの $S = 1/2$ ハイゼンベルグ模型 $H = X_0 X_1 + Y_0 Y_1 + Z_0 Z_1$ に対して $D = 2$ の

VH ansatz は

$$U(\theta_1, \dots, \theta_6) = e^{i\theta_1 X_0 X_1} e^{i\theta_2 Y_0 Y_1} e^{i\theta_3 Z_0 Z_1} e^{i\theta_4 X_0 X_1} e^{i\theta_5 Y_0 Y_1} e^{i\theta_6 Z_0 Z_1} \quad (17)$$

という回路で定義される。

この ansatz は D が十分大きいとき時間発展演算子 e^{-iHt} の Trotter 分解を再現することができるから、ハミルトニアン基底状態や励起状態を表現する能力が高い可能性がある。^{*10} 一方でデメリットとして、ゲート数が多くなりがちで NISQ デバイスでの実行は容易ではないことが挙げられる。 m 量子ビットのパウリ回転ゲートは $O(m)$ 個程度の CNOT と 1 量子ビット回転ゲートとして NISQ デバイス上で実行されるので、ハミルトニアンに多くの non-local な項が含まれる場合は CNOT の総数が非常に増えることになる。

テーマ 2：パラメータをどのように最適化するか？

VQE に関する第二のテーマとして、どのように変分パラメータ θ を最適化するのかという問題がある。VQE は変分法に基づいているため、最適化の良し悪しで最終的なエネルギー固有値計算結果の精度が決定される。ここでは最適化に重要な勾配 $\frac{\partial E(\theta)}{\partial \theta}$ の計算手法と、そもそも最適化が困難になり得ることを示唆する barren plateau という話題を紹介する。

■パラメータシフトルール エネルギー期待値 $E(\theta)$ を最小化する際に、最も基本的な情報が勾配 $\frac{\partial E(\theta)}{\partial \theta}$ である。御手洗 [23] らは、NISQ デバイスを用いた量子機械学習を提案した論文の中で、エネルギー期待値の解析的な勾配を直接測る手法を提案した。すなわち、ansatz が式 (14) のような形をしている時、勾配 (θ_i に対する偏微分) が

$$\frac{\partial E(\theta)}{\partial \theta_i} = \frac{1}{2} (E(\theta_1, \dots, \theta_i + \pi/2, \dots, \theta_M) - E(\theta_1, \dots, \theta_i - \pi/2, \dots, \theta_M)) \quad (18)$$

という π だけ離れた 2 点の差分で厳密に与えられることを示した。これはパラメータシフトルールと呼ばれている。証明はパウリ行列 P に対する $e^{\pm i\pi P/4} = \frac{1}{\sqrt{2}}(I \pm iP)$ という恒等式から従い、良い計算練習なのでぜひ自分の手で確かめてほしい。

この公式の利点は、ノイズや統計揺らぎに弱い微小差分 $E(\theta_1, \dots, \theta_i + \epsilon, \dots, \theta_M) - E(\theta_1, \dots, \theta_i, \dots, \theta_M)$ ではなく ($\epsilon \sim 0$)、大きな有限間隔 (π) の差分で勾配が計算できる点である。

■Barren plateau 問題 量子回路の最適化に関する最も大きな問題の一つが、barren plateau (BP) 問題である [24]。BP には様々な種類があるが、最も基本的なのは以下の場合である。

Barren plateau (概略) O を n 量子ビット系の observable とし、 $\{U(\theta)\}_\theta$ を 2-design と呼ばれるランダムな量子回路とする。^{*11} この時、 O の期待値の勾配の各成分 $\frac{\partial}{\partial \theta_i} (\langle 0|U(\theta)^\dagger O U(\theta)|0\rangle)$ の θ に関するランダム平均と分散は、 n について指数的に小さくなる。よって n が大きいとき、 θ の値をランダムに一つとると、ほぼ確率 1 でその点での勾配がほぼ 0 になる。

2-design の数学的な定義は説明しないが、Haar random と呼ばれるユニタリ行列での性質の良いランダム平均をある程度再現するようなランダムなユニタリ行列たちのことであり、local なランダム 2 量子ビットゲートを $O(2n)$ 層程度重ねると近似的に 2-design に達することが知られている [25]。勾配の値がほぼ 0 になってしまうということは、BP が発生する場合、ランダムな初期値 θ_0 から勾配法を用いても θ は最適化できないことになる。BP は変分量子アルゴリズム活用の障壁となりうる重要な問題であり、その性質や回避方法が盛んに研究されている。

^{*10} 詳細な議論は省くが、量子断熱時間発展と関係させることができる。

^{*11} より正確には、 θ を (何らかの確率分布の下で) ランダムに取った時に $\{U(\theta)\}_\theta$ が 2-design になるとする。

5 まとめと展望：VQE は古典コンピュータを超えられるのか？

本集中ゼミでは、VQE という具体的な NISQ デバイス上でのアルゴリズムを取り上げてその利点や課題を述べてきた。最後に、VQE を代表とする NISQ デバイスによる計算が古典コンピュータによる同等の計算を実用的に上回るにはどのような点が重要になるかを述べて結語としたい。

n 量子ビットの量子多体系のハミルトニアン基底状態を求める問題について、NISQ デバイスによる VQE では、ゲート操作の忠実度次第ではあるが $n = 100, 200$ といった大きなサイズを扱うことが可能である。NISQ デバイスはこの点で、 $n \lesssim 30\sim 50$ でしか実行できない古典コンピュータでの厳密対角化法を上回る可能性がある。しかし、VQE は変分法に基づいており、その精度を左右する様々な不確定要素が存在する。系の基底状態を十分少ないパラメータ数の ansatz で書くことができるのかや、系の大きさ n に対して基底状態の近似精度がどのように振る舞うのかといった情報を明らかにしていくことが、NISQ デバイスによる計算を実用化するのに必要不可欠となる。また、精度の保証が明確でないという点を考えると、むしろ比較すべき古典手法としてはテンソルネットワーク法や変分モンテカルロ法（2次元では $n \sim 100$ 程度？）が考えられ、これらの手法と比較したメリットやデメリットを深く考察していく必要がある。この集中ゼミが、単に「NISQ デバイスで計算を実行してみました」という研究ではなく、NISQ デバイスを用いて古典コンピュータを真に凌駕するような研究を生み出すきっかけとなれば幸いである。

参考文献

- [1] M. A. Nielsen and I. L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition*. Cambridge University Press (2010).
- [2] R. P. Feynman. “Simulating physics with computers”. *International Journal of Theoretical Physics* **21**, 467–488 (1982).
- [3] D. Deutsch. “Quantum theory, the Church-Turing principle and the universal quantum computer”. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences* **400**, 97–117 (1985).
- [4] P. Shor. “Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring”. In *Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, 124–134 (1994).
- [5] P. W. Shor. “Polynomial-Time Algorithms for Prime Factorization and Discrete Logarithms on a Quantum Computer”. *SIAM Journal on Computing* **26**, 1484–1509 (1997).
- [6] P. W. Shor. “Scheme for reducing decoherence in quantum computer memory”. *Phys. Rev. A* **52**, R2493–R2496 (1995).
- [7] A. M. Steane. “Error Correcting Codes in Quantum Theory”. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 793–797 (1996).
- [8] R. Barends *et al.* “Superconducting quantum circuits at the surface code threshold for fault tolerance”. *Nature* **508**, 500–503 (2014).
- [9] R. Landauer. “Is quantum mechanics useful?” *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Physical and Engineering Sciences* **353**, 367–376 (1995).
- [10] K. Fujii. “Quantum Computation with Topological Codes: from qubit to topological fault-tolerance”. *arXiv:1504.01444* (2015).
- [11] J. Preskill. “Quantum Computing in the NISQ era and beyond”. *Quantum* **2**, 79 (2018).
- [12] F. Arute *et al.* “Quantum supremacy using a programmable superconducting processor”. *Nature*

- 574, 505–510 (2019).
- [13] 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* **90**, 032001 (2021).
 - [14] 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”. *Nat. Commun.* **5** (2014).
 - [15] K. M. Nakanishi, K. Mitarai and K. Fujii. “Subspace-search variational quantum eigensolver for excited states”. *Phys. Rev. Research* **1**, 033062 (2019).
 - [16] R. M. Parrish, E. G. Hohenstein, P. L. McMahon and T. J. Martínez. “Quantum Computation of Electronic Transitions Using a Variational Quantum Eigensolver”. *Phys. Rev. Lett.* **122**, 230401 (2019).
 - [17] O. Higgott, D. Wang and S. Brierley. “Variational Quantum Computation of Excited States”. *Quantum* **3**, 156 (2019).
 - [18] J. R. McClean, M. E. Kimchi-Schwartz, J. Carter and W. A. de Jong. “Hybrid quantum-classical hierarchy for mitigation of decoherence and determination of excited states”. *Phys. Rev. A* **95**, 042308 (2017).
 - [19] 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* **549**, 242–246 (2017).
 - [20] B. T. Gard, L. Zhu, G. S. Barron, N. J. Mayhall, S. E. Economou and E. Barnes. “Efficient symmetry-preserving state preparation circuits for the variational quantum eigensolver algorithm”. *npj Quantum Inf.* **6** (2020).
 - [21] Y. Ibe, Y. O. Nakagawa, N. Earnest, T. Yamamoto, K. Mitarai, Q. Gao and T. Kobayashi. “Calculating transition amplitudes by variational quantum deflation”. *arXiv:2002.11724* (2020).
 - [22] D. Wecker, M. B. Hastings and M. Troyer. “Progress towards practical quantum variational algorithms”. *Phys. Rev. A* **92**, 042303 (2015).
 - [23] K. Mitarai, M. Negoro, M. Kitagawa and K. Fujii. “Quantum circuit learning”. *Phys. Rev. A* **98**, 032309 (2018).
 - [24] J. R. McClean, S. Boixo, V. N. Smelyanskiy, R. Babbush and H. Neven. “Barren plateaus in quantum neural network training landscapes”. *Nature Communications* **9**, 4812 (2018).
 - [25] N. Hunter-Jones. “Unitary designs from statistical mechanics in random quantum circuits”. *arXiv:1905.12053* (2019).