

# 変分量子固有値ソルバにおける波動関数補正法の開発

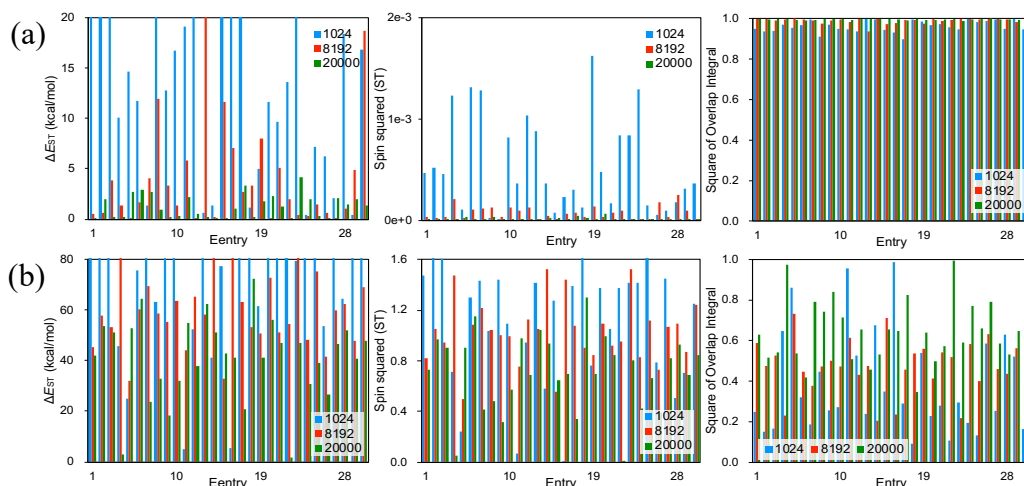
<sup>1</sup>慶大院理工, <sup>2</sup>慶大KQCC, <sup>3</sup>IBM, <sup>4</sup>三菱ケミカル

○後町 慈生<sup>1,2</sup>, 中村 肇<sup>2,3</sup>, 高 玓<sup>2,4</sup>, 小林 高雄<sup>2,4</sup>, 稲垣 泰一<sup>1,2</sup>, 畑中 美穂<sup>1,2</sup>

**【序】**量子コンピュータによる電子状態計算アルゴリズムとして、変分量子固有値ソルバ(VQE)が提案されている<sup>[1]</sup>。これは、パラメタを用いて記述した波動関数について、エネルギー期待値を最小化するパラメタを探索することで基底状態を求める手法である。VQEによる分子の計算例は複数報告されているが、現在の量子コンピュータの性能の制約から、得られる精度は化学反応の解析や構造探索に十分とは言えない。本研究では、様々な実行条件でのVQE結果を解析し、そこに含まれる誤差を低減する手法について検討する。

**【方法】**計算対象としてエチレン分子の(一重項)基底状態の安定構造を選び、HOMO, LUMOからなる活性空間でVQE計算を行った。基底関数はSTO-3Gとし、パリティマッピングによって量子ビットの表現に変換した。アンザッツ回路には、我々が過去に用いたspin-restrictedアンザッツ<sup>[2]</sup>と、実行が容易なReal Amplitudesアンザッツを用いた。実行環境にはQiskitパッケージを用い、ノイズなし・無限サンプリング(state vector)、ノイズなし・有限サンプリング(ideal-Aer)、ノイズあり・有限サンプリング(noisy-Aer)の3通りの条件を検討し、サンプリング回数(ショット数)は1024, 8192, 20000とした。さらに、ideal-Aerとnoisy-Aerについては、VQEと同条件の量子状態トモグラフィー(ST)によって密度行列を求め、これを純粋化してエネルギーとスピン2乗の値を評価した。加えて、state vectorシミュレータでVQE結果と真の解との重なり積分を計算し、量子ビット状態がどれだけ正しいかを評価した。なお、有限サンプリングであるideal-Aer, noisy-Aerでは試行ごとに結果が異なるため、平均的な性能を調べるために各条件で独立に30回ずつ計算を行った。

**【結果】**ノイズ環境下(noisy-Aer)のVQE結果をFig. 1に示す。(a), (b)はそれぞれspin-restrictedおよびReal Amplitudesアンザッツを用いた結果であり、STで評価したエネルギー誤差 $\Delta E_{ST}$ およびスピン2乗と、state vectorシミュレータで評価した重なり積分の2乗を示している。(a)ではショット数の増加に対して $\Delta E_{ST}$ が減少すると同時に、重なり積分の2乗は1に近づき、真の解に近づくことが確認できた(なお、一重項の部分空間を張るアンザッツであるためスピン2乗はほぼ0であった)。一方、(b)では20000ショットでも $\Delta E_{ST}$ が大きく、重なり積分の2乗の平均値は0.64、スピン2乗の平均値は0.71であった。この場合は、一重項でないスピン状態の混入により適切な基底状態に収束していないと考えられる。このようにノイズを考慮した計算の場合、VQEが目的の電子状態に収束するかどうかは必ずしも明らかでない。当日は、このような問題に対して取りうる対処法とその効果についても発表する。



**Fig. 1.** VQE results from the noisy-Aer simulator. Energy deviation  $\Delta E$ , spin squared, the square of the overlap integral of the resulting states for (a) the spin-restricted and (b) the Real Amplitudes ansätze.

## 【参考文献】

[1] A. Peruzzo *et al.* *Nat. Commun.* **5**, 4213 (2014).

[2] S. Gocho *et al.* arXiv:2110.14448 (2021).