

# 技術面談用資料

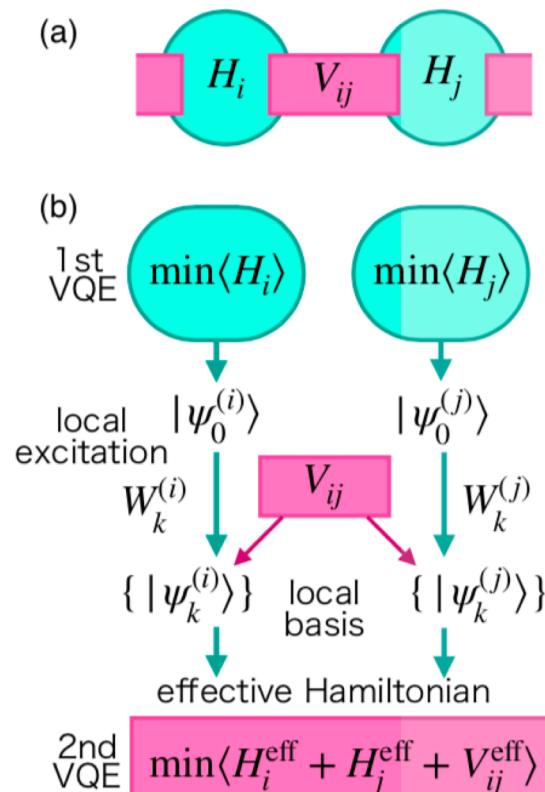
- 技術課題1
  - Deep VQEの概要
  - Deep VQEの詳細
  - Deep VQEの計算結果
- 技術課題2
- 技術課題3

# Deep VQEの概要

- モチベーション

- 実機で扱える量子ビット数を超えるハミルトニアンの基底状態を計算したい。

- 手法の概要



1. ハミルトニアンを部分系と相互作用に分割。
2. 部分系をVQEで計算し基底状態を求める。
3. 相互作用と基底状態から局所基底を作成する。
4. 局所基底でハミルトニアンの行列要素を計算する。
5. 相互作用を取り入れた有効ハミルトニアンを作成する。
6. 有効ハミルトニアンに対してVQEを実行する。

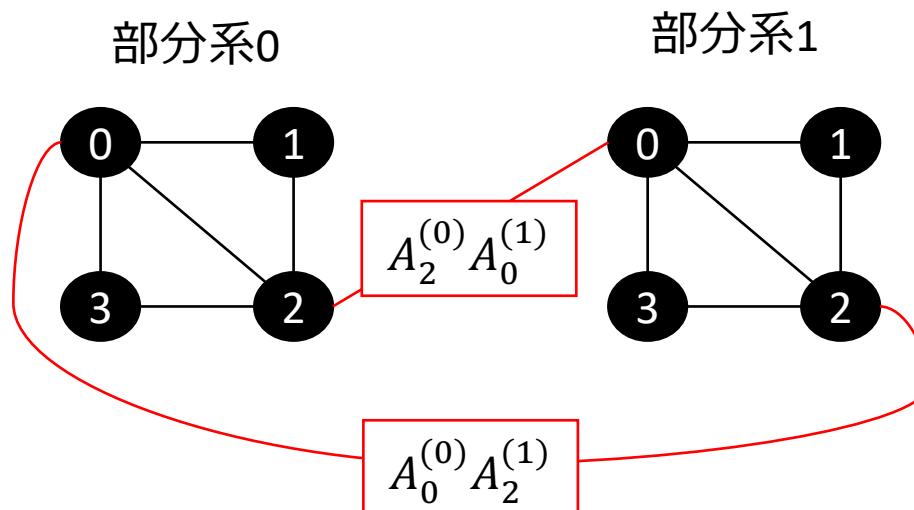
量子ビット数の削減

# Deep VQEの詳細

- ・ハミルトニアンの定義:  $\mathcal{H} = \sum_i \mathcal{H}_i + \sum_{i,j} V_{ij}$

- ・ $\mathcal{H}_i$ : 部分系*i*のハミルトニアン(量子ビット数をnとする。)
- ・ $V_{ij}$ : 部分系*i*と部分系*j*の間に働く相互作用:  $V_{ij} = \sum_k v_k W_k^{(i)} W_k^{(j)}$

- ・例 :



$$\begin{aligned}\mathcal{H}_i &= \sum_{(\mu,\nu)} (X_\mu^{(i)} X_\nu^{(i)} + Y_\mu^{(i)} Y_\nu^{(i)} + Z_\mu^{(i)} Z_\nu^{(i)}) \\ &= \sum_{(\mu,\nu)} \sum_{A=X,y,Z} A_\mu^{(i)} A_\nu^{(i)}\end{aligned}$$

$$V_{01} = \sum_{A=X,Y,Z} (A_0^{(i)} A_2^{(j)} + A_2^{(i)} A_0^{(j)})$$

# Deep VQEの詳細

- 部分系 $\mathcal{H}_i$ をVQEで解いて基底状態 $|\psi_0^{(i)}\rangle$ を求める。

$$|\psi_0^{(i)}\rangle = U_i(\theta^{(i),*}) |0^n\rangle \quad \theta^{(i),*} \equiv \operatorname{argmin}_{\theta} \langle 0^n | U_i(\theta^{(i)})^\dagger \mathcal{H}_i U_i(\theta^{(i)}) | 0^n \rangle$$

- 相互作用項に含まれる演算子 $W_k^{(i)}$ を $|\psi_0^{(i)}\rangle$ に作用して $|\psi_k^{(i)}\rangle$ を作る。

$$V_{ij} = \sum_k v_k W_k^{(i)} W_k^{(j)} \quad |\psi_k^{(i)}\rangle \equiv W_k^{(i)} |\psi_0^{(i)}\rangle$$

- ただし $W_1^{(i)} = \mathbb{E}$  (恒等演算子)と定義する。
- 下の例だと全部で7個の状態が作られる。

$$V_{01} = \sum_{A=X,Y,Z} (A_0^{(i)} A_2^{(j)} + A_2^{(i)} A_0^{(j)}) \quad \{ |\psi_0^{(i)}\rangle, A_0^{(i)} |\psi_0^{(i)}\rangle, A_2^{(i)} |\psi_0^{(i)}\rangle \}$$

# Deep VQEの詳細

- $|\psi_k^{(i)}\rangle$ を正規直交化する。(グラムシュミットの直交化法)

$$|\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle = \frac{1}{C} \left( |\psi_k^{(i)}\rangle - \sum_{l < k} \langle \tilde{\psi}_l^{(i)} | \psi_k^{(i)} \rangle |\tilde{\psi}_l^{(i)}\rangle \right)$$

- $|\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle$ に対して  $|\psi_k^{(i)}\rangle$ にかかる係数を  $P_{kk}$  とする。
- $P_{kl}$ を求めるには  $\langle \psi_k^{(i)} | \psi_l^{(i)} \rangle$  を測定する必要がある。

$$|\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle = \sum_{k'=1}^K P_{kk'}^{(i)} |\psi_{k'}^{(i)}\rangle$$

$$P_{kl}^{(i)} = P^{(i)}(\{ \langle \psi_l^{(i)} | \psi_k^{(i)} \rangle \}) = P^{(i)}(\langle \psi_0^{(i)} | W_k^{(i)\dagger} W_l^{(i)} | \psi_0^{(i)} \rangle)$$

# Deep VQEの詳細

- $|\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle$ を用いて部分系の有効ハミルトニアンを作成する。

$$\begin{aligned} (\mathcal{H}_i^{\text{eff}})_{kl} &= \langle \tilde{\psi}_k^{(i)} | \mathcal{H}_i | \tilde{\psi}_l^{(i)} \rangle \\ &= \sum_{k',l'} P_{kk'}^{(i)*} \langle \psi_{k'}^{(i)} | \mathcal{H}_i | \psi_{l'}^{(i)} \rangle P_{ll'}^{(i)} \end{aligned}$$

- 実際の計算では以下の物理量を測定して、以下の関係から行列要素を求める。

$$\begin{aligned} (\bar{\mathcal{H}}_i^{\text{eff}})_{kl} &= \langle \psi_k^{(i)} | \mathcal{H}_i | \psi_l^{(i)} \rangle \\ &= \langle \psi_0^{(i)} | \underbrace{W_k^{(i)\dagger} \mathcal{H}_i W_l^{(i)}}_{\text{ }} | \psi_0^{(i)} \rangle \end{aligned}$$

$$(\mathcal{H}_i^{\text{eff}})_{kl} = \left( P^{(i)*} \bar{\mathcal{H}}_i^{\text{eff}} P^{(i)T} \right)_{kl}$$

# Deep VQEの詳細

- $|\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle$ を用いて相互作用の有効ハミルトニアンを作成する。

$$(V_{ij}^{\text{eff}})_{kk' ll'} = \langle \tilde{\psi}_k^{(i)} | \langle \tilde{\psi}_{k'}^{(j)} | V_{ij} | \tilde{\psi}_l^{(i)} \rangle | \tilde{\psi}_{l'}^{(j)} \rangle$$

- $V_{ij}$ は次の形をしているので行列要素を計算する際には各部分系で相互作用に含まれる演算子の期待値が計算できれば良い。

$$V_{ij} = \sum_{\nu} v_{\nu} W_{\nu}^{(i)} \otimes W_{\nu}^{(j)} \quad (V_{ij}^{\text{eff}})_{kk' ll'} = \sum_{\nu} v_{\nu} \langle \tilde{\psi}_k^{(i)} | W_{\nu}^{(i)} | \tilde{\psi}_l^{(i)} \rangle \langle \tilde{\psi}_{k'}^{(j)} | W_{\nu}^{(j)} | \tilde{\psi}_{l'}^{(j)} \rangle$$

- 実際に観測する物理量は次のようになる。

$$\langle \tilde{\psi}_k^{(i)} | W_{\nu}^{(i)} | \tilde{\psi}_l^{(i)} \rangle = \sum_{k', l'} P_{kk'}^{(i)*} \langle \psi_0^{(i)} | W_{k'}^{(i)} \dagger W_{\nu}^{(i)} W_{l'}^{(i)} | \psi_0^{(i)} \rangle P_{ll'}^{(i)} = \left( P^{(i)*} \bar{W}_{\nu}^{(i), \text{eff}} P^{(i)T} \right)_{kl}$$

$$(\bar{W}_{\nu}^{(i), \text{eff}})_{kl} \equiv \langle \psi_k^{(i)} | W_{\nu}^{(i)} | \psi_l^{(i)} \rangle = \langle \psi_0^{(i)} | W_k^{(i)} \dagger W_{\nu}^{(i)} W_l^{(i)} | \psi_0^{(i)} \rangle$$

---

# Deep VQEの詳細

- 実機では $|\psi_0^{(i)}\rangle$ を用いて以下の演算子の期待値を計算する必要がある。

$$\{W_k^{(i)\dagger} W_l^{(i)}\}, \{W_k^{(i)\dagger} \mathcal{H}_i W_l^{(i)}\}, \{W_k^{(i)\dagger} W_\mu^{(i)} W_l^{(i)}\}$$

- 演算子として有効ハミルトニアンを表すと以下のようになる。

$$(\mathcal{H}_i^{\text{eff}})_{kl} |\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle \langle \tilde{\psi}_l^{(i)}| \quad (V_{ij}^{\text{eff}})_{kk' ll'} |\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle \langle \tilde{\psi}_l^{(i)}| \otimes |\tilde{\psi}_{k'}^{(j)}\rangle \langle \tilde{\psi}_{l'}^{(j)}|$$

- $|\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle \langle \tilde{\psi}_l^{(i)}|$ を量子ゲートで表現する必要がある。

- その前に $|\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle$ と量子ビットを対応させる。
- K個の新たな局所基底を表すのに必要な量子ビット数は $\lceil \log_2 K \rceil$ となる。
- K=7の例：3量子ビットが必要になる。(元の状態は4ビット必要)

$$|\tilde{\psi}_1^{(i)}\rangle = |000\rangle, |\tilde{\psi}_2^{(i)}\rangle = |001\rangle, |\tilde{\psi}_3^{(i)}\rangle = |010\rangle$$

$$|\tilde{\psi}_4^{(i)}\rangle = |011\rangle, |\tilde{\psi}_5^{(i)}\rangle = |100\rangle, |\tilde{\psi}_6^{(i)}\rangle = |101\rangle, |\tilde{\psi}_7^{(i)}\rangle = |110\rangle$$

# Deep VQEの詳細

- $|\tilde{\psi}_0^{(i)}\rangle\langle\tilde{\psi}_1^{(i)}| = |000\rangle\langle 001|$  の場合
  - $|\tilde{\psi}_0^{(i)}\rangle\langle\tilde{\psi}_1^{(i)}| = |0\rangle\langle 0|_0 \otimes |0\rangle\langle 0|_1 \otimes |0\rangle\langle 1|_2$
  - 以下の関係から量子ゲートを用いて表現できる。

$$|0\rangle\langle 0|_i = \frac{1}{2}(I_i + Z_i) \quad |0\rangle\langle 1|_i = \frac{1}{2}(X_i - X_i Z_i)$$

- 有効ハミルトニアン全体は以下のようになる。

$$\mathcal{H}^{\text{eff}} = \sum_i \mathcal{H}_i^{\text{eff}} + \sum_{ij} V_{ij}^{\text{eff}}$$

$$\mathcal{H}_i^{\text{eff}} = \sum_{kl} (\mathcal{H}_i^{\text{eff}})_{kl} |\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle\langle\tilde{\psi}_l^{(i)}|$$

$$V_{ij}^{\text{eff}} = \sum_{kk' ll'} (V_{ij}^{\text{eff}})_{kk' ll'} |\tilde{\psi}_k^{(i)}\rangle\langle\tilde{\psi}_l^{(i)}| \otimes |\tilde{\psi}_{k'}^{(j)}\rangle\langle\tilde{\psi}_{l'}^{(j)}|$$

# Deep VQEの詳細

- 有効ハミルトニアンを新たな部分系と相互作用に分割して、部分系のハミルトニアンに対してVQEを行う。
  - 全体の有効ハミルトニアン

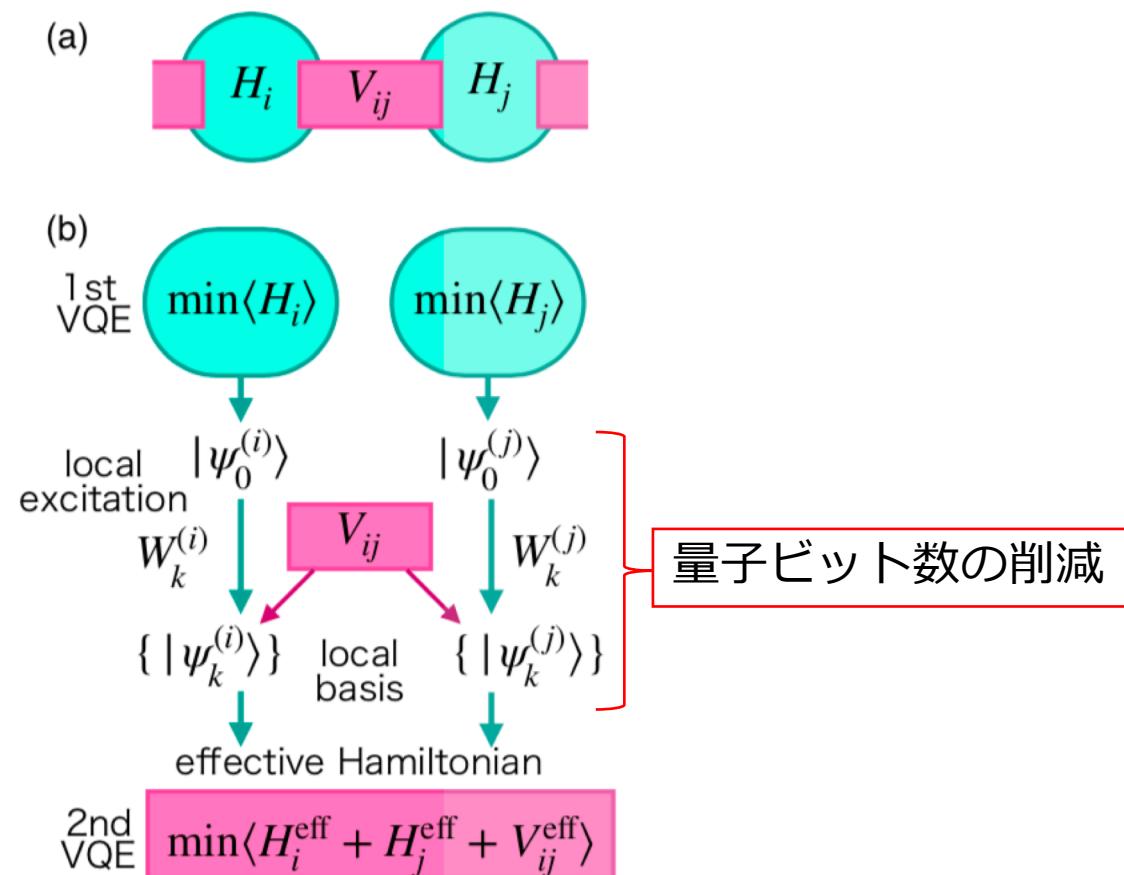
$$\mathcal{H}^{\text{eff}} = \sum_i \mathcal{H}_i^{\text{eff}} + \sum_{ij} V_{ij}^{\text{eff}}$$

- 新たな部分系
  - 無視していた部分系の相互作用を取り入れる。

$$\bar{\mathcal{H}}_{k=(i,j)}^{\text{eff}} = \mathcal{H}_i^{\text{eff}} + \mathcal{H}_j^{\text{eff}} + V_{ij}^{\text{eff}}$$

$$\bar{\mathcal{H}}^{\text{eff}} = \sum_k \bar{\mathcal{H}}_k^{\text{eff}} + \sum_{kl} \bar{V}_{kl}^{\text{eff}}$$

VQEで計算する



# Deep VQEの詳細

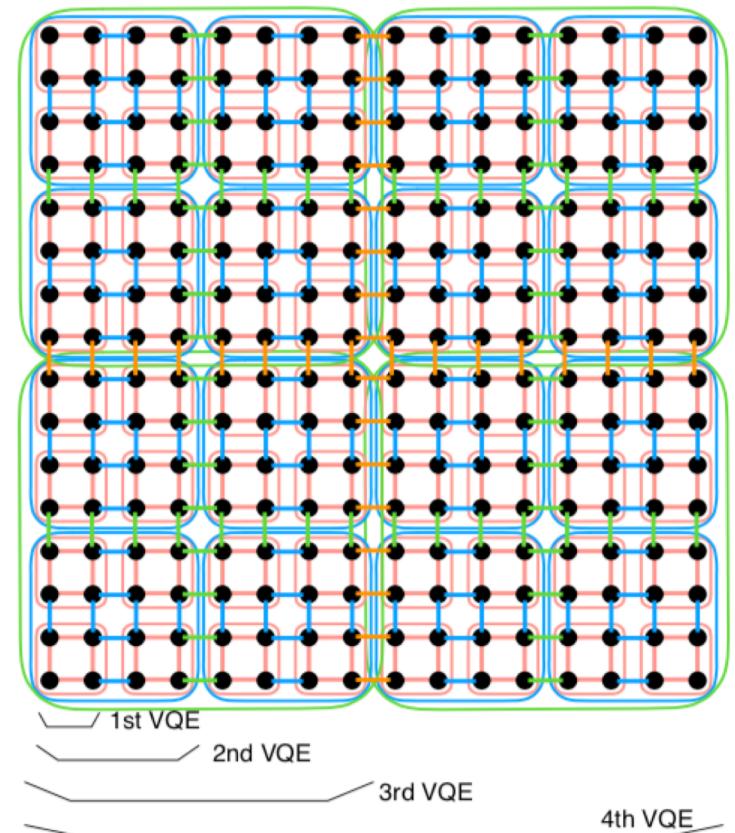
- 量子ビット数について
  - 最初の部分系の数を $N$ とし、1つの部分系で必要なビット数が $n$ の場合、合計で $M = nN$ ビットが必要であった。
  - 1つの部分系の局所基底の数を $K$ とすると $m = N[\log_2 K]$ ビットになる。
  - 量子ビット数が $M$ から $m$ に削減できる。
- 計算量について
  - 有効ハミルトニアンの作成 :  $O(\text{poly}(M)K^2N)$ 
$$\{W_k^{(i)\dagger} W_l^{(i)}\}, \{W_k^{(i)\dagger} \mathcal{H}_i W_l^{(i)}\}, \{W_k^{(i)\dagger} W_\mu^{(i)} W_l^{(i)}\}$$
  - 有効ハミルトニアンの計算 :  $O(\text{poly}(M)K^4)$

# Deep VQEの詳細

- ・実際の計算ではこれまでに説明した一連の流れを何回か繰り返す。
- ・ $k$ : Deep VQEを繰り返す回数。
- ・ $l^k$ :  $k$ 番目に増える格子の倍数。
- ・番目に扱う格子の数は $l^k \times l^k$ .

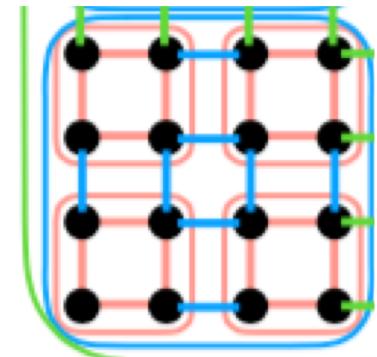
$$l^k = \prod_{j=1}^{k-1} l^j$$

- ・この時に必要な量子ビット数は $O[(l^k)^2 \log_2 l^{k-1}]$
- ・右の例では $k = 4, l^k = 2$ .



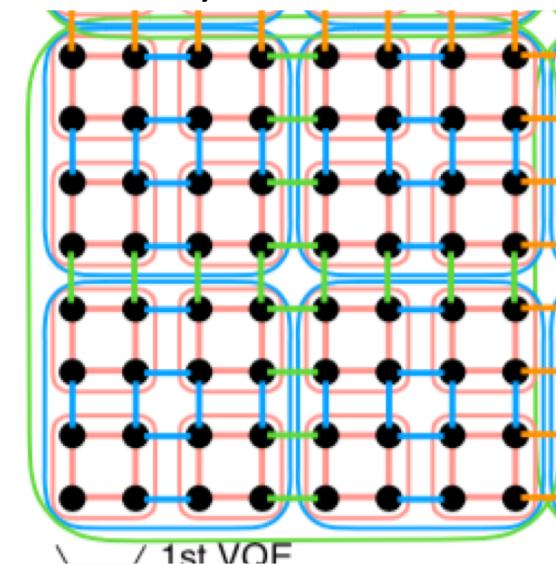
# Deep VQEの詳細

- 相互作用は1つのエッジに対して3つの演算子をが存在する。
- $k = 1$ では $2*2$ の格子を1つの部分系とする。**(赤の四角の格子)**
  - この部分系を解いて基底状態を得る。
- $k = 2$ で $4*4$ の格子を1つの部分系とする。**(青の四角の格子)**
  - VQEを行うためのハミルトニアンを作成していく。
  - **赤の四角の格子**を繋いでいる**青い線**が相互作用を表している。
  - **青い線**は4本のびているので $4*3=12$ 個の演算子が存在する。
  - 1つの**赤の四角**の格子の局所基底の数は $K = 13$ である。
  - 必要な量子ビット数は $\lceil \log_2 13 \rceil = 4$ ビットになる。
  - **青の四角**の中には4セットこれががあるので合計で $4*4=16$ ビットになる。
  - この基底を用いて有効ハミルトニアンを作成する。**(青の四角の格子)**
  - VQEでこの有効ハミルトニアンの基底状態を求める。



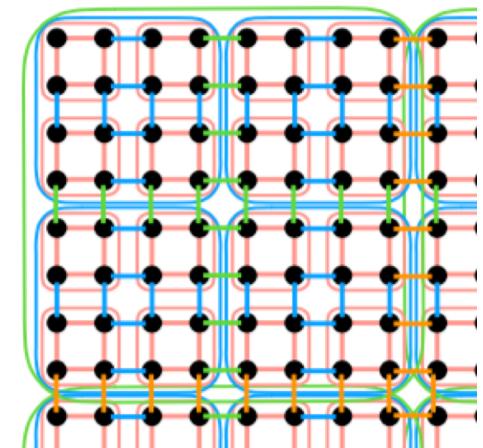
# Deep VQEの詳細

- $k = 3$ で $8 \times 8$ の格子を1つの部分系とする。(緑の四角の格子)
  - VQEを行うためのハミルトニアンを作成していく。
  - 青の四角の格子を繋いでいる緑の線が相互作用を表している。
  - 緑の線は8本のびているので $8 \times 3 = 24$ 個の演算子が存在する。
  - 1つの青の四角の格子の局所基底の数は $K = 13 + 24 = 37$ である。
  - 必要な量子ビット数は $\lceil \log_2 37 \rceil = 6$ ビットになる。
  - 緑の四角の中には4セットこれががあるので合計で $4 \times 6 = 24$ ビットになる。
  - この基底を用いて有効ハミルトニアンを作成する。(緑の四角の格子)
  - VQEでこの有効ハミルトニアンの基底状態を求める。



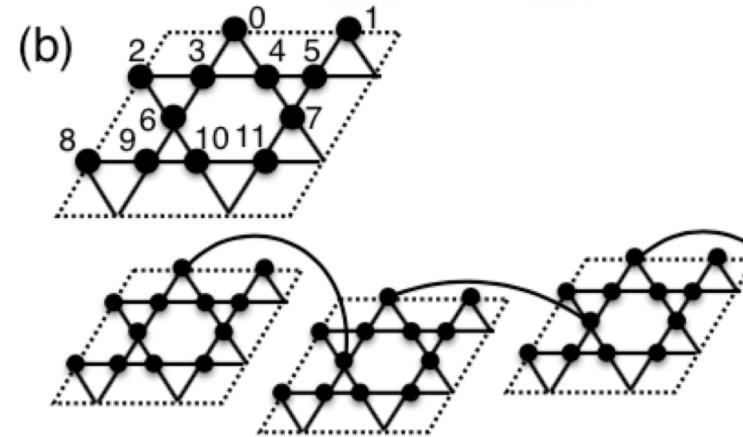
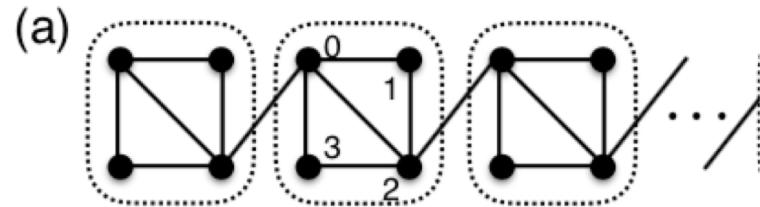
# Deep VQEの詳細

- $k = 4$ で $16 \times 16$ の格子、つまり求めたい系全体を対象とする。
  - VQEを行うためのハミルトニアンを作成していく。
  - 緑の四角の格子を繋いでいるオレンジの線が相互作用を表している。
  - オレンジの線は16本のびているので $16 \times 3 = 48$ 個の演算子が存在する。
  - 1つの緑の四角の格子の局所基底の数は  $K = 13 + 24 + 48 = 85$  である。
  - 必要な量子ビット数は  $\lceil \log_2 85 \rceil = 7$  ビットになる。
  - 全体には4セットこれががあるので合計で  $7 \times 6 = 28$  ビットになる。
  - この基底を用いて有効ハミルトニアンを作成する。
  - VQEでこの有効ハミルトニアンの基底状態を求める。
- 32量子ビットが扱える実機であれば  $32 \times 32 = 1024$  ビット必要な系を Deep VQE で計算することができる。



# Deep VQEの計算結果

- 反強磁性ハイゼンベルグモデルを1次元上に繋げたモデルで計算。



- (a)のハミルトニアン：

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_i &= \sum_{(\mu,\nu)} (X_\mu^{(i)} X_\nu^{(i)} + Y_\mu^{(i)} Y_\nu^{(i)} + Z_\mu^{(i)} Z_\nu^{(i)}) & V_{01} &= \sum_{A=X,Y,Z} (A_0^{(i)} A_2^{(j)} + A_2^{(i)} A_0^{(j)}) \\ &= \sum_{(\mu,\nu)} \sum_{A=X,y,Z} A_\mu^{(i)} A_\nu^{(i)}\end{aligned}$$

# Deep VQEの計算結果

- (a)では7個の局所基底で有効ハミルトニアンを作成する。

$$V_{01} = \sum_{A=X,Y,Z} (A_0^{(i)} A_2^{(j)} + A_2^{(i)} A_0^{(j)}) \quad \{|\psi_0^{(i)}\rangle, A_0^{(i)} |\psi_0^{(i)}\rangle, A_2^{(i)} |\psi_0^{(i)}\rangle\}$$

- 3量子ビットが必要になる。(元の状態は4ビット必要)

## • 計算結果

TABLE I. Numerical results for  $4 \times N$  Heisenberg anti-ferromagnetic systems. “Deep VQE” indicates the results obtained by the proposed scheme. “Local” indicates the energy calculated from a product state of the local ground state  $|\psi_0\rangle$ , i.e.,  $H_{00}^{\text{eff}}$ . “Effective” means the exact ground state energy of  $H^{\text{eff}}$ . “ITE” is a ground state energy calculated by imaginary time evolution on a simulator.

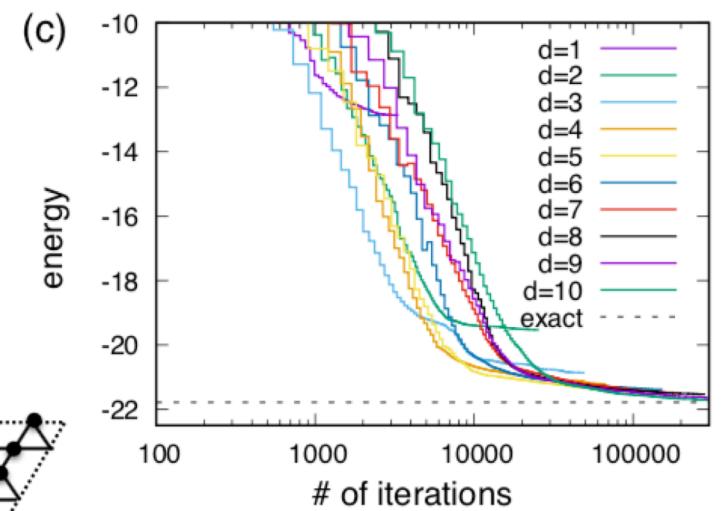
system	Deep VQE	Local	Effective	ITE
$4 \times 2$	-14.46	-14.00	-14.46	-14.46
$4 \times 3$	-21.89	-21.00	-21.89	-21.92
$4 \times 4$	-29.31	-28.00	-29.32	-29.39
$4 \times 5$	-36.70	-35.00	-36.75	-36.85
$4 \times 6$	-44.13	-42.00	NA	-44.31
$4 \times 8$	-59.02	-56.00	NA	NA

# Deep VQEの計算結果

- (b)の結果

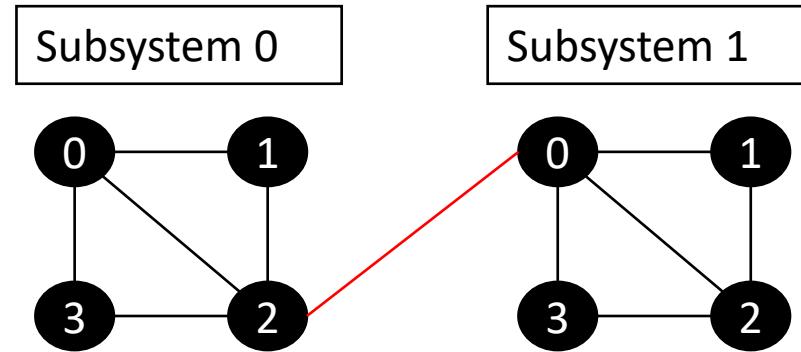
- 部分系の厳密解は-21.78
- VQEの結果は-21.72

- $N=2$ では-43.8
- $N=41$ では-87.9
- いずれも有効ハミルトニアンの行列要素の固有値と一定している。



## 技術課題2

- 4量子ビットの反強磁性ハイゼンベルグモデル( $N=2$ )をDeep VQEで実装。



- 厳密対角化による計算は"DeepVQE\_Others.ipynb"で実行しました。
- VQEによる計算は"DeepVQE.ipynb"で実行しました。
  - ただし厳密対角化の結果と一致していないのでミスがあります。
  - 私の理解・実装が不正確な点があるのでご教授お願い致します。

Size	Deep VQE	Local	Effective	ITE
$N=2$	16.59	14.0	14.46	14.46

# 技術課題3

- 実装に至らなかったので基本方針だけを記載します。
- ハミルトニアンは論文の例で記載されているような対称性のあるものを仮定する。
- ユーザーは分割回数 $k$ , 分割倍数 $l^{(k)}$ , 相互作用の場所(境界)と演算子を設定する。
- $l^{(k)} \times l^{(k)}$ で囲まれる格子を1つの部分系とし、その部分系に寄与する相互作用を抽出して"DeepVQE.ipynb"と同様の計算を行う。
- 対称性から部分系の個数と同じ回数だけ計算を実行する必要はない。
  - どれか1つの部分系だけを計算して個数分だけ結果を複製する。
- 得られた有効ハミルトニアンの基底状態を求め、次の格子の部分系を定義する。
  - 格子の大きさは右の関係式からも止まる。
  - これまで相互作用の情報を格納しておく。
$$l^k = \prod_{j=1}^{k-1} l^j$$
- 次の格子の部分系のハミルトニアンを作成してVQEを実行する。
  - 前回は無視していた相互作用を取り入れる。
- 上記を分割回数分だけ繰り返す。