FALQON と基底状態 FQA

1 FQA の一般原理（量子リアプノフ制御）

FQA (Feedback-based Quantum Algorithm) は、変分量子アルゴリズム (VQA) が直面する古典最適化の困難を回避するために、量子リアプノフ制御 (QLC) の原理を用いる手法である。

1.1 連続時間（QLC の基本）

システムの時間発展を、問題ハミルトニアン H_p と、制御可能なドライバハミルトニアン H_d で記述する。

$$i\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = (H_p + \beta(t)H_d)|\psi(t)\rangle$$

ここで、$\beta(t)$ は我々が設計する実数値の制御パラメータである。

目的は、コスト関数 $J(t) = \langle\psi(t)|H_p|\psi(t)\rangle$ を最小化することである。QLC の戦略は、コスト関数が時間とともに単調減少するように $\beta(t)$ を決定すること、すなわち $\frac{dJ}{dt} \leq 0$ を目指す。

$J(t)$ の時間微分を計算すると、

$$\begin{aligned}
\frac{dJ}{dt} &= \frac{d}{dt}\langle\psi(t)|H_p|\psi(t)\rangle \\
&= \left(\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\right)H_p|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|H_p\left(\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle\right) \\
&= i\langle\psi(t)|(H_p + \beta(t)H_d)H_p|\psi(t)\rangle - i\langle\psi(t)|H_p(H_p + \beta(t)H_d)|\psi(t)\rangle \\
&= i\beta(t)\langle\psi(t)|[H_d, H_p]|\psi(t)\rangle \\
&\equiv \beta(t)A(t)
\end{aligned}$$

ここで、$A(t) \equiv \langle\psi(t)|i[H_d, H_p]|\psi(t)\rangle$ と定義した。H_d, H_p がエルミートであれば $A(t)$ は実数である。

単調減少の条件 $\frac{dJ}{dt} \leq 0$ を満たす最も単純なフィードバック則は、

$$\beta(t) = -A(t)$$

と選ぶことである。これにより、

$$\frac{dJ}{dt} = -(A(t))^2 \leq 0$$

となり、コスト関数の単調減少が保証される。

1.2 離散時間（FQA のデジタル化）

連続的な時間発展を Trotter 分解によってデジタル化（離散化）する。

$$|\psi(t+\Delta t)\rangle \approx e^{-i\beta(t)H_d\Delta t}e^{-iH_p\Delta t}|\psi(t)\rangle$$

これを k ステップの量子回路とみなす。

$$|\psi_k\rangle = U_d(\beta_k)U_p|\psi_{k-1}\rangle$$

ここで $U_p \equiv e^{-iH_p\Delta t}$、$U_d(\beta_k) \equiv e^{-i\beta_k H_d\Delta t}$ である。

フィードバック則 $\beta(t) = -A(t)$ も離散化する。レイヤー k のパラメータ β_k は、レイヤー $k-1$ の状態 $|\psi_{k-1}\rangle$ から測定される A_{k-1} によって決定される。

$$\beta_k = -A_{k-1} = -\langle\psi_{k-1}|i[H_d, H_p]|\psi_{k-1}\rangle$$

これにより、FQA は古典最適化なしに、測定とフィードバックのみでパラメータを逐次的に決定し、コスト関数を（Δt が十分小さい限り）単調に減少させる。

1.3 FALQON (組合せ最適化問題)

FALQON は、組合せ最適化問題を対象とする。

- **問題ハミルトニアン** (H_p): コスト関数を表す対角ハミルトニアン H_C を設定する。

$$H_p = H_C$$

- **ドライバハミルトニアン** (H_d): QAOA のミキサーハミルトニアンに対応する $H_X = \sum_i X_i$ を設定する。

$$H_d = H_X$$

- **FALQON のフィードバック則**: したがって、レイヤー k でのフィードバック則は以下のようになる。

$$\beta_k^{(\text{FALQON})} = -\langle \psi_{k-1} | i[H_X, H_C] | \psi_{k-1} \rangle$$

1.4 基底状態 FQA

この手法は、物理系や化学系のハミルトニアン H の基底状態を求めることを対象とする。

- **問題ハミルトニアン** (H_p): 基底状態を求めたいターゲットのハミルトニアン H そのものを設定する。

$$H_p = H = H_{\text{non-int}} + H_{\text{int}}$$

ここで、 $H_{\text{non-int}}$ はハミルトニアンの「**非相互作用項**」または基底状態の準備が容易な部分（例：1 粒子項、運動項）を指します。一方、H_{int} は系の複雑さの要因となる「**相互作用項**」（例：2 粒子項、オンサイト斥力項）を指します。

- **ドライバハミルトニアン** (H_d): H_p の一部であり、かつ基底状態の準備が容易な部分（通常は非相互作用項）を選択する。

$$H_d = H_{\text{non-int}}$$

- **基底状態 FQA のフィードバック則**: したがって、レイヤー k でのフィードバック則は以下のようになる。

$$\begin{aligned}
\beta_k^{(\text{G.S.})} &= -\langle \psi_{k-1} | i[H_{\text{non-int}}, H] | \psi_{k-1} \rangle \\
&= -\langle \psi_{k-1} | i[H_{\text{non-int}}, H_{\text{non-int}} + H_{\text{int}}] | \psi_{k-1} \rangle \\
&= -\langle \psi_{k-1} | i[H_{\text{non-int}}, H_{\text{int}}] | \psi_{k-1} \rangle
\end{aligned}$$

1.5 具体例 (フェルミ・ハバードモデル)

- **基底状態 FQA**:

$$\begin{aligned}
&H_p = H_{FH} = T + V \\
&H_d = T \\
&\beta_k = -\langle \psi_{k-1} | i[T, V] | \psi_{k-1} \rangle
\end{aligned}$$

ここで、T と V は以下のように定義される。

  - T: フェルミオンが格子サイト間をホッピングする「**運動エネルギー項**」（非相互作用項 $H_{\text{non-int}}$ に相当）。

$$T = -\sum_{\langle m,n \rangle, \sigma} t_{m,n} (\hat{a}_{m\sigma}^\dagger \hat{a}_{n\sigma} + \hat{a}_{n\sigma}^\dagger \hat{a}_{m\sigma})$$

    ($\langle m,n \rangle$ は隣接サイト対、$\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$ はスピン、$\hat{a}^\dagger, \hat{a}$ は生成・消滅演算子)

  - V: 同じサイトに異なるスピンのフェルミオンが存在する時の「**オンサイト相互作用項**」（相互作用項 H_{int} に相当）。

$$V = U \sum_k \hat{n}_{k\uparrow} \hat{n}_{k\downarrow}$$

    (U は相互作用強度、$\hat{n}_{k\sigma} = \hat{a}_{k\sigma}^\dagger \hat{a}_{k\sigma}$ は k サイトの数演算子)

References

[1] A. B. Magann, K. M. Rudinger, M. D. Grace, and M. Sarovar, *Feedback-Based Quantum Optimization*, Phys. Rev. Lett. **129**, 250502 (2022).

[2] J. B. Larsen, M. D. Grace, A. D. Baczewski, and A. B. Magann, *Feedback-based quantum algorithms for ground state preparation*, arXiv preprint arXiv:2303.02917 (2023).