

位相推定アルゴリズムを用いた分子の エネルギー計算にかかるコストの推定

小林 望
東京大学/QunaSys

10/16 第一回量子ソフトウェア研究発表会

目次

- インTRODクシヨソ
- 手法
- 結果
- 展望

イントロダクション

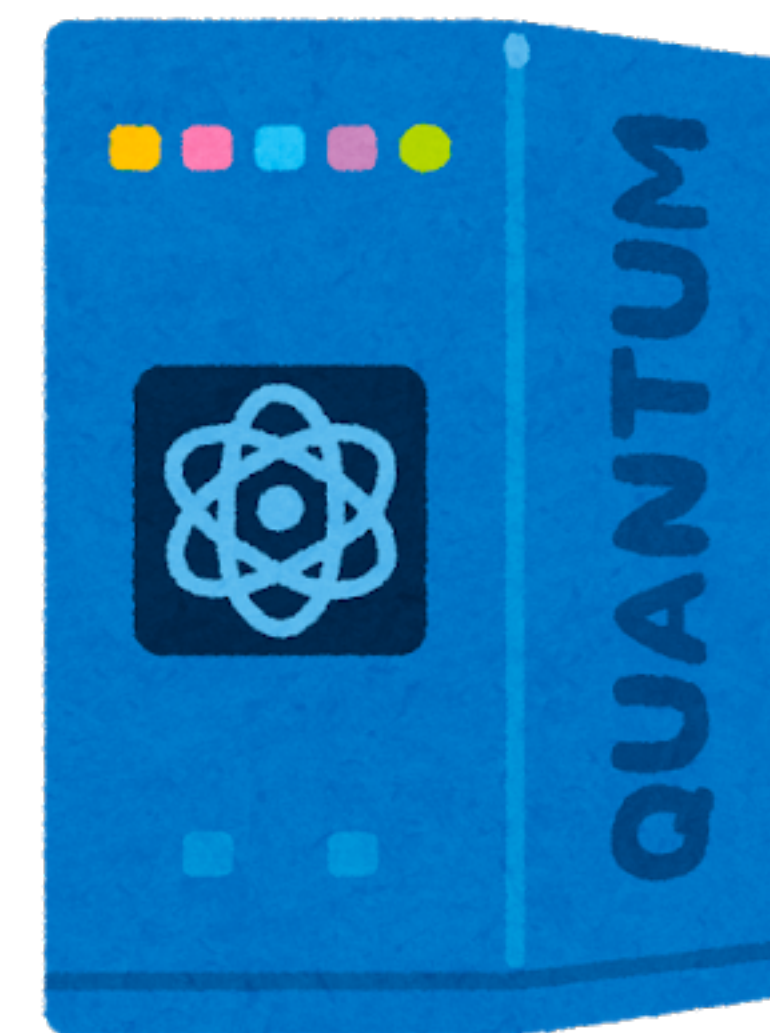
イントロダクション

- 近年の量子計算分野の目覚ましい発展→量子コンピュータへの社会的関心増大
- 特に注目すべき量子アルゴリズム: 位相推定アルゴリズム
 - 古典と比べて指数的に高速であることが確実視
 - いわゆるNISQデバイス(誤り訂正機能のない量子コンピュータ)では難しい
 - 誤り訂正機能付き量子コンピュータで実現が期待



量子化学への応用

- 古典計算の限界
 - シュレーディンガー方程式に基づく理論計算では原子数に対し指数関数的にリソースが増加
 - 金属錯体や酵素等産業上重要な分子系での計算が困難
- 位相推定アルゴリズム
 - 必要なリソースが原子数に対して多項式程度(!)

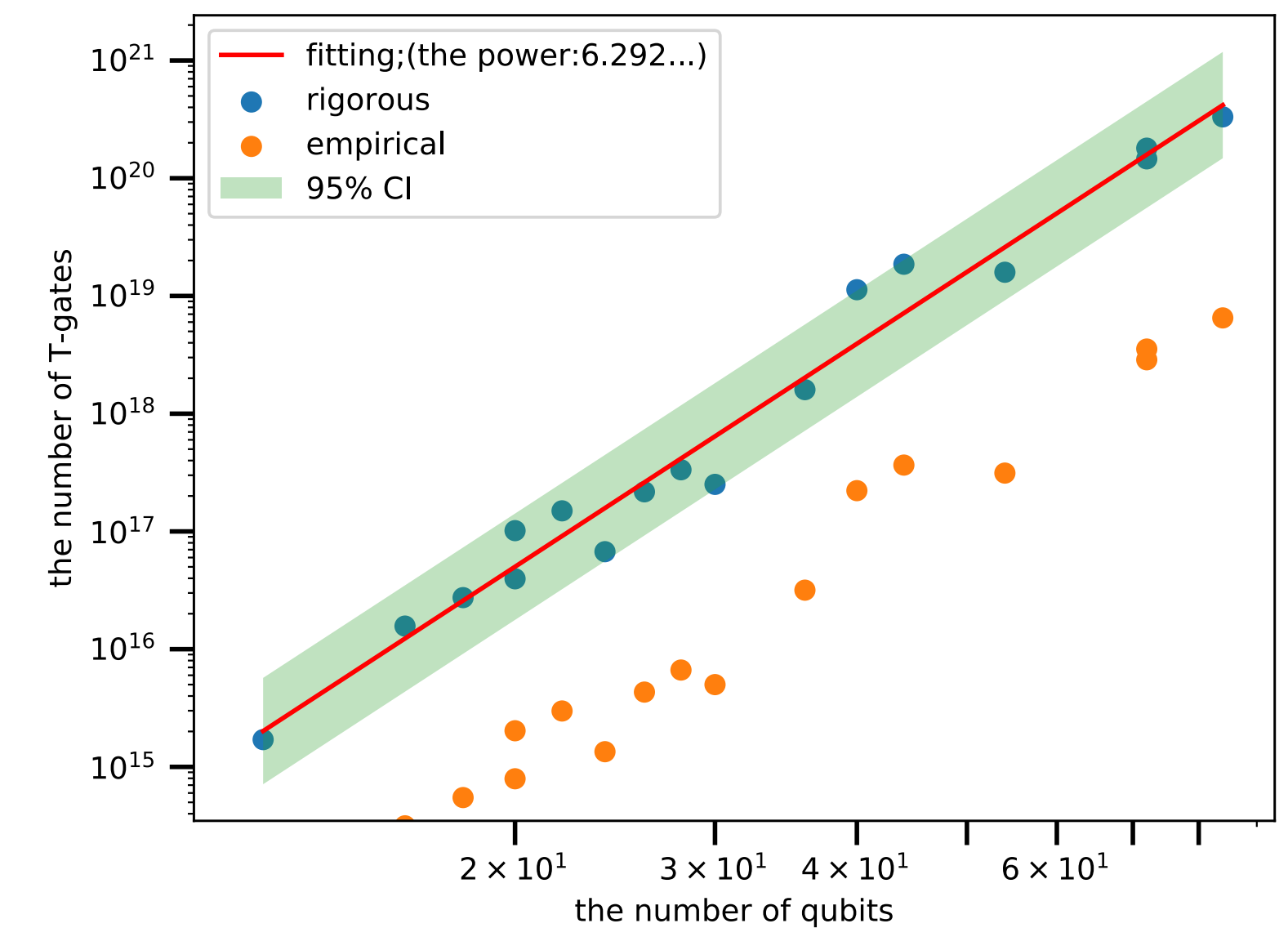


Q.

実際にアルゴリズムを実行するのにどの程度計算コストが必要か？

まとめ

- 位相推定アルゴリズムを分子のエネルギー計算に応用した際の計算コストを推定
- 先行研究[1]の手法を基にプログラムを実装
 - 計算コスト=必要なTゲートの数
 - 種々のエラー量に対して最適化(最小化)を行った



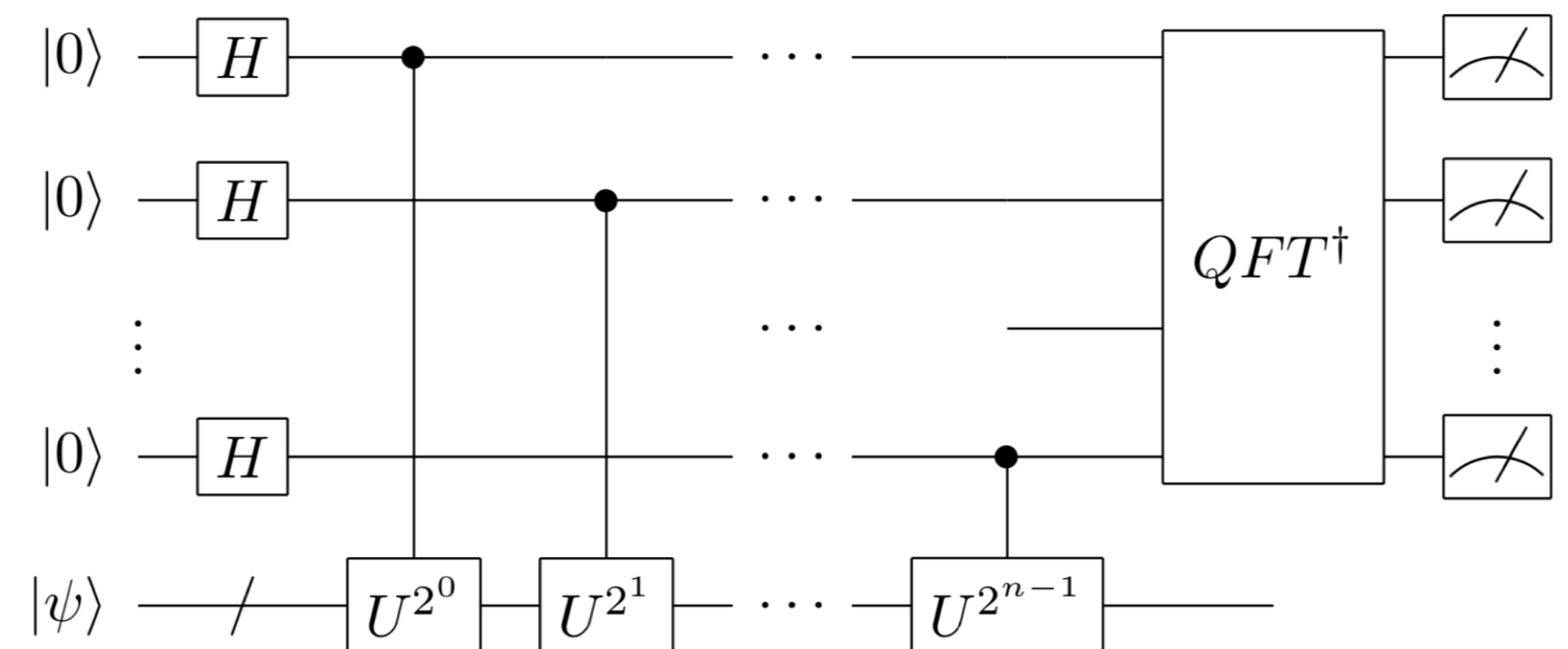
手法

位相推定アルゴリズムとは？

- ユニタリ演算子 U の固有値 $e^{i2\pi\phi}$ を高速で計算し **2進数表示** で出力するアルゴリズム
- 用意するもの
 - 固有値 $e^{i2\pi\phi}$ に対応する固有状態(もしくはそれと十分重なりがあるもの) $|\psi\rangle$
 - t 個の補助qubit

$$|u_i\rangle |0\rangle^{\otimes t} \xrightarrow{QPE} |u_i\rangle |\tilde{\phi}\rangle$$

$$\tilde{\phi} = \phi_1 \phi_2 \cdots \phi_t$$



位相推定アルゴリズムによる分子シミュレーション

- 分子ハミルトニアン H の固有値に応用したい
- ユニタリ演算子 $U = e^{-iHt}$ に対して位相推定アルゴリズムを用いれば良い
- どのように時間発展演算子を量子コンピュータ上で実装するか？
 - トロッター分解
 - Qubitization
 - ...
- 今回はトロッター分解を用いる

トロッター分解を用いたユニタリ演算子の実装

- 分子系のハミルトニアンは第二量子化形式で書き下せる:

$$H = \sum_{ij} h_{ij} c_i^\dagger c_j + \sum_{ijkl} h_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_k c_l = \sum H_i$$

- Jordan-Wigner変換を用いて c_i, c_j^\dagger をパウリ演算子の積 $P_\alpha \in \{I, X, Y, Z\}^{\otimes n}$ に変換

- トロッター分解を用いて e^{-iHt} を近似する:

$$e^{-iHt} \sim \left(\prod_{j=1}^L e^{-iH_j dt/2} \prod_{j=L}^1 e^{-iH_j dt/2} \right)^R$$

- $R = t/dt$: トロッター数

- 各演算子 H_j はパウリ演算子で書けているので、 e^{-iH_j} は回転ゲート → CNOTゲートと1量子ビット

ゲートで実装可

トロッター分解による誤差見積もり

- エネルギー計算の定量評価にはトロッター分解の誤差を把握する必要
- この誤差の上限はモンテカルロ法を用いて以下のように推定できる:

$$\Delta E_{TS}/dt^2 \leq \frac{L^3}{M} \sum_{j=1}^M \Gamma(\alpha_j, \beta_j, \alpha'_j) = h \quad \Gamma(\alpha, \beta, \alpha') := 4 \|H_\alpha\| \|H_\beta\| \|H_{\alpha'}\| \\ \times \left(\delta_{\alpha>\beta} \delta_{\alpha'>\beta} + \delta_{\beta>\alpha} \delta_{\alpha',\alpha} \right) W(\alpha, \beta, \alpha')$$

$W(\alpha, \beta, \alpha')$: $[H_\alpha, [H_\beta, H_{\alpha'}]]$ がnonzeroの時1, zeroの時0

- 欲しい精度= ΔE_{TS} が与えられた時に分割幅 dt をどの程度取ればよいかわかる:

$$dt = \sqrt{\frac{\Delta E_{TS}}{h}}$$

位相推定アルゴリズムを用いた計算コストの推定

- 実際に位相推定アルゴリズムを用いたエネルギー計算には誤り訂正機能が必要(精度の保った計算→多数の補助qubit)
- 今回はSurface codeと呼ばれる誤り訂正アルゴリズムを考える
 - Cliffordゲート: オーバーヘッド小
 - non-Cliffordゲート (TゲートやToffoliゲート): **オーバーヘッド大**
- 全体の計算コストの中でTゲートの数が支配的な寄与をする
 - **計算コスト = 必要なTゲートの数**とみなす

コスト関数

- アルゴリズム全体で必要なTゲート数は、各部分アルゴリズム実行にかかる3つの誤差 $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3$ の関数として次のように与えられる:

$$C = 2L \left\lceil \frac{\alpha}{\epsilon_1} \right\rceil \left\lceil \beta \sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_2}} \right\rceil (\gamma \log_2 \left(\frac{2M}{\epsilon_3} \left\lceil \beta \sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_2}} \right\rceil \right) + \delta)$$

L : ハミルトニアン の 項数

α : 位相推定アルゴリズムによる定数

β : $\epsilon_2 = 0.1 \text{mHa}$ としたときのトロッター数

γ, δ : Tゲートに分解するアルゴリズムによる定数

→
$$C = 2M \frac{\alpha}{\epsilon_1} \beta \sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_2}} (\gamma \log_2 \left(\frac{2M\beta}{\epsilon_3} \right) + \delta)$$

誤差見積もりと計算コスト

- トロッター分解の誤差 $\epsilon_2 = \Delta\epsilon_{TS}$ 以外にアルゴリズム実行にかかる誤差がある
 - 位相推定アルゴリズムで補助ビットを有限にとった事による誤差 ϵ_1
 - ユニタリ演算子を量子ゲートに分解した時の誤差 ϵ_3
- 位相推定アルゴリズムに要求する計算精度を ϵ と置くと,

$$\epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3 \leq \epsilon$$

↑ここではchemical accuracy= 0.1mHaとする

- 上の条件式が満たされるように計算コスト=Tゲート数を最小化したい

コスト関数とその最適化

解くべき問題

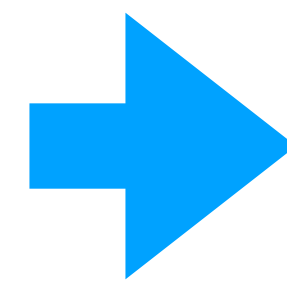
$$\min_{\epsilon_i} C = \min_{\epsilon_i} 2M \frac{\alpha}{\epsilon_1} \beta \sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_2}} (\gamma \log_2(\frac{2M\beta}{\epsilon_3}) + \delta)$$

$$\text{with } g(\epsilon_i) = \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3 - \epsilon \leq 0$$

この最小値問題の局所解はいわゆるKKT(Karush-Kuhn-Tucker)条件を満たす.

微分可能な関数 $f, g_i, h_j : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ に対して,

$$\min f(x) \quad \text{s.t. } g_i(x) \leq 0, h_j(x) = 0$$



$$\nabla f(\bar{x}) + \sum_i \lambda_i \nabla g_i(\bar{x}) + \sum_j \mu_j \nabla h_j(\bar{x}) = 0$$

$$\lambda_i g_i(\bar{x}) = 0, \lambda_i \geq 0, g_i(\bar{x}) \leq 0$$

$$\mu_j : \text{任意}, h_j(\bar{x}) = 0$$

を満たす λ_i, μ_j が存在

の局所最小解を \bar{x} とすると,

コスト関数最適化まとめ

- KKT条件を用いると、 $C = 2M \frac{\alpha}{\epsilon_1} \beta \sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_2}} (\gamma \log_2(\frac{2M\beta}{\epsilon_3}) + \delta)$ を最小にする ϵ_i の組は

$$\epsilon_1 = 2\epsilon_2, \epsilon_2 = \frac{\epsilon - \epsilon_3}{3} \quad \epsilon_3 + 3 \frac{\epsilon}{2\gamma} (\delta \log 2 + \gamma \log(\frac{2M\beta}{\epsilon_3})) - \epsilon = 0$$

の解として与えられる。式のパラメータ $(\alpha, \beta, \gamma, \delta)$ が与えられればこれは数值的に解ける！

- コスト関数=T-gateの数を最適化するアルゴリズムを与える！
- β の値をモンテカルロ計算で求める必要あり

結果及び考察

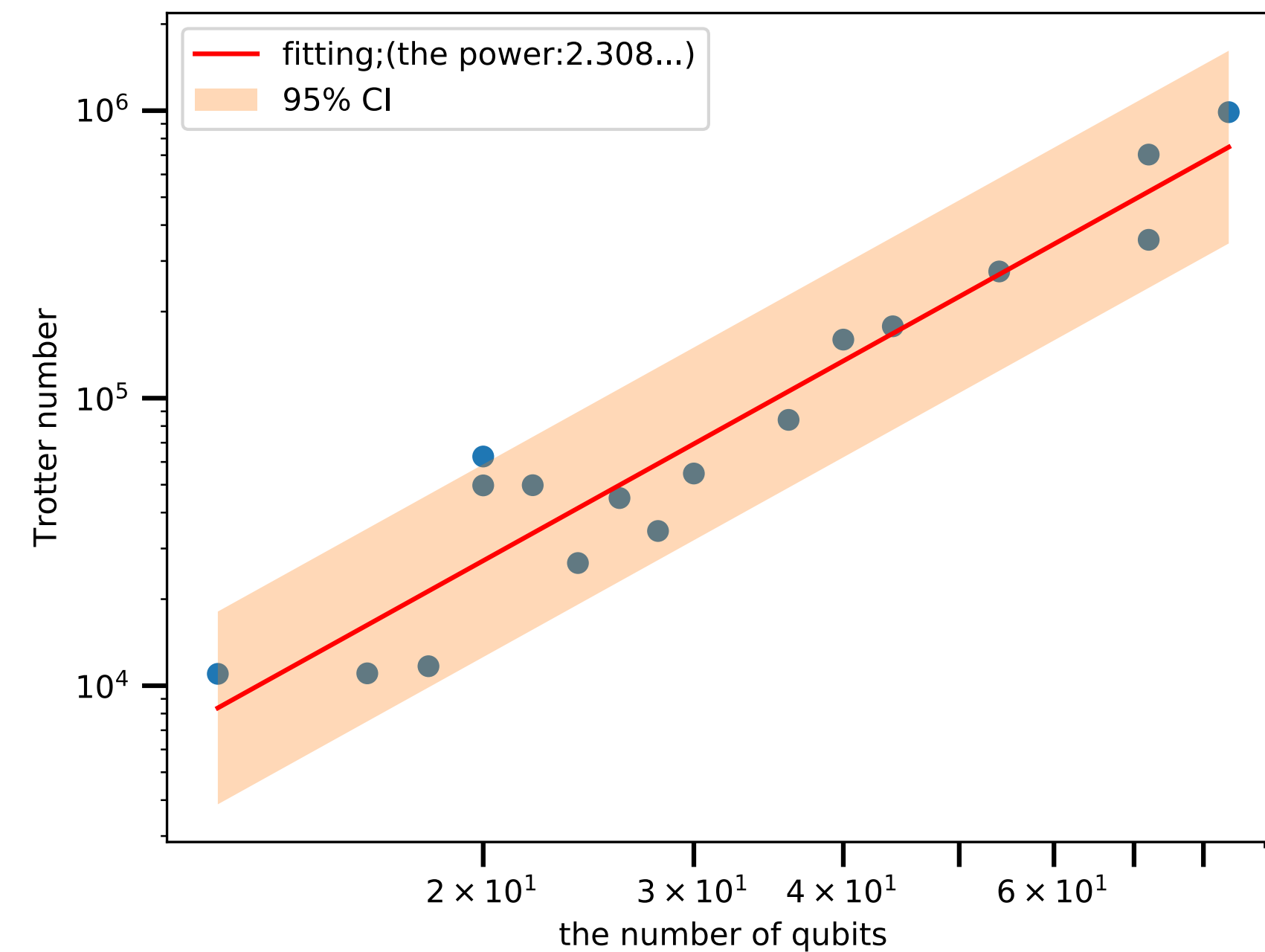
トロッター数 β の計算

$\epsilon_2 = 0.1\text{mHa}$ となる時のトロッター数 β を求める

分子データ

molecule	basis	qubits	molecule	basis	qubits
HF	sto-6g	12	CO ₂	sto-6g	30
NH ₃	sto-6g	16	CO ₂	sto-3g	30
CH ₄	sto-6g	18	H ₂ O	dzvp	36
HCl	sto-6g	20	NH ₃	dzvp	40
F ₂	sto-6g	20	CH ₄	dzvp	44
H ₂ S	sto-6g	22	CO ₂	p321	54
C ₂ H ₂	sto-6g	24	C ₂ H ₄	dzvp	72
H ₂ O	p321	26	H ₂ O	p6311ss	72
C ₂ H ₄	sto-6g	28	CO ₂	dzvp	84

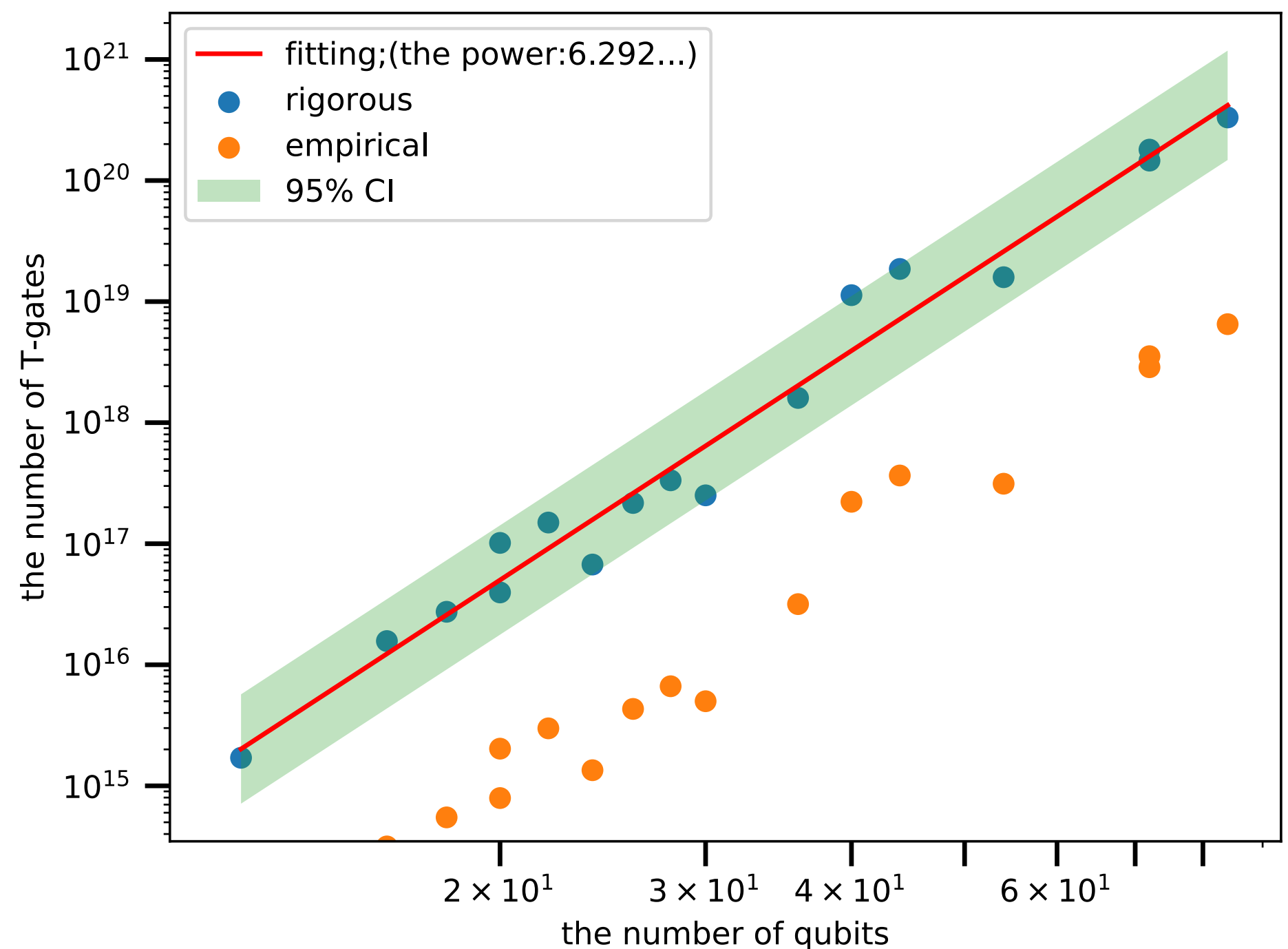
モンテカルロ計算結果 (サンプル数 10^8)



→べき則 $\beta = O(N^{2.30\dots})$

コスト関数見積もり結果

コスト見積もり結果



使用したパラメータ

	α	γ	δ
rigorous	8π	4	11
empirical	$\pi/2$	1.15	9.2

1Tゲートの実行時間を10nsとしても
qubit数20程度で数年の計算時間

注意:今回のコスト値は上限値。小さい系で直接
評価するとempiricalより $O(10^5)$ 程度小さくなる
→見積もりに工夫の余地

今後の展望

- 計算効率化手法を取り入れたコスト推定プログラムの実装
- トロッター数の現実的な見積もりの実装
- qubitizationと呼ばれる手法を基にしたコスト推定の実装
- etc...

バックアップ

コスト関数とその最適化

- 今の場合、コスト関数を最小化する ϵ_i が存在する必要条件は、

$$-\nabla C(\epsilon_i) = \lambda \nabla g(\epsilon_i) \quad \dots\dots \textcircled{1}$$

$$\lambda g(\epsilon_i) = 0, \lambda \geq 0, g \leq 0 \quad \longrightarrow \quad \lambda = 0 \text{ かつ } g(\epsilon_i) < 0 \text{ もしくは } \lambda > 0 \text{ かつ } g(\epsilon_i) = 0$$

なる λ が存在すること

- ①を整理すると、

$$\frac{2M\alpha\beta\sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_2}}}{\epsilon_1^2} \left(\frac{\gamma \log(\frac{2M\beta}{\epsilon_3})}{\log 2} + \delta \right) = \lambda$$

$$\frac{M\alpha\beta\sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_2}}}{\epsilon_1\epsilon_2} \left(\frac{\gamma \log(\frac{2M\beta}{\epsilon_3})}{\log 2} + \delta \right) = \lambda$$

$$\frac{2M\alpha\beta\gamma\sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_2}}}{\epsilon_1\epsilon_3 \log 2} = \lambda$$

$\lambda = 0$ かつ $g(\epsilon_i) < 0$ は無理であろうことがわかる。

コスト関数とその最適化

最終的な条件式は、

$$\begin{aligned} \frac{2M\alpha\beta\sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_2}}}{\epsilon_1^2} \left(\frac{\gamma \log(\frac{2M\beta}{\epsilon_3})}{\log 2} + \delta \right) &= \lambda & \frac{M\alpha\beta\sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_2}}}{\epsilon_1\epsilon_2} \left(\frac{\gamma \log(\frac{2M\beta}{\epsilon_3})}{\log 2} + \delta \right) &= \lambda & \frac{2M\alpha\beta\gamma\sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_2}}}{\epsilon_1\epsilon_3 \log 2} &= \lambda \\ \epsilon - \epsilon_1 - \epsilon_2 - \epsilon_3 &= 0 \end{aligned}$$

これを解けば良い。式同士を割ったり代入したりして

$$\epsilon_1 = 2\epsilon_2, \quad \epsilon_2 = \frac{\epsilon - \epsilon_3}{3} \quad \epsilon_3 + 3\frac{\epsilon}{2\gamma}(\delta \log 2 + \gamma \log(\frac{2M\beta}{\epsilon_3})) - \epsilon = 0$$

➡ 陽に解けないので数值的に解く 23