

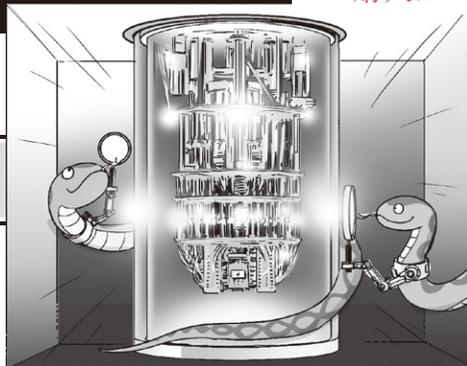
古典コンピュータと量子コンピュータを併用する
量子古典ハイブリッド・アルゴリズムの使用例

Pythonで体験!

量子コンピュータ

前編 量子化学計算を体験

辻野 孝一



現在(2022年4月)の量子コンピュータは、演算中に発生するエラーが原因で正しい計算を行うことが困難です。このエラーを訂正する機能が実現されて初めて量子コンピュータは実用的な計算を行うことができると言われています。しかし誤り訂正を備えた誤り耐性量子コンピュータの実現はまだ先のことだと言われています。

現在ではエラー訂正ができない小/中規模(数百量子ビット程度)の量子コンピュータの利用方法の開発が進められています。このような量子コンピュータをNISQ(Noisy Intermediate-Scale Quantum)デバイスと呼びます。NISQでは古典コンピュータと量子コンピュータを併用する量子古典ハイブリッド・アルゴリズムというアプローチが主流です。このようなアプローチで量子化学計算や量子機械学習、最適化、金融などへの応用が進められています。

本稿では量子古典ハイブリッド・アルゴリズムの1つであるVQE(Variational Quantum Eigen solver, 変分量子固有値ソルバ)を用いた量子化学計算を体験します。量子コンピュータをプログラミングするフレームワークとしてIBMのQiskit(Quantum Information Software Kit)を使います。QiskitはPython言語を用いてプログラミングします。

前編では、量子古典ハイブリッド・アルゴリズムを解説します。Qiskitの基本的な使い方を解説したのちに、VQEを用いた量子化学計算を体験します。本稿の目次は次の通りです。

- ①量子古典ハイブリッド・アルゴリズムの必要性
- ②Qiskitの基本的な使い方
- ③VQEで量子化学計算を体験

(編集部)

① 量子古典ハイブリッド・アルゴリズムの必要性

● 制約や課題

現在(2022年4月)、量子コンピュータは多くの制約事項や課題をかかえています。

▶ コヒーレンス時間

量子ビットの状態は、古典ビットと比べるとノイズに弱く、変化しやすいものです。例えば、 $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の重ね合わせ状態は一定時間経つと壊れてしまいます。このような量子性が保たれる間の時間をコヒーレンス時間といいます。コヒーレンス時間内に計算を終えないといけません。コヒーレンス時間の制約により深い量子回路の計算が困難になります。

▶ エラー

古典コンピュータにおいても、メモリなどでビット・エラーが生じるように、量子コンピュータでも、温度や磁場のゆらぎ、隣接量子ビットの動作などのノイズの影響を受けて、ゲート操作時や測定時にエラーが起こることがあります。現時点の量子コンピュータは、演算中に発生するエラーが原因で正しい計算を行うことが困難です。このようなエラーに対処できる誤り訂正ありの量子コンピュータが実現されて初めて、実用的な計算を行うことができると言われています。

● 現時点の解決策

誤り訂正ありの量子コンピュータの実現は、まだまだ先のことです。現在実現されている量子コンピュータは、NISQ(Noisy Intermediate-Scale Quantum)デバイスと呼ばれるものです。NISQデバイスとは先述のエラーが存在する小/中規模の量子コンピュータを指します。

現時点では、性能/機能に制約が多いNISQのうまい使い方の研究開発が進められていたり、誤り訂正ありの量子コンピュータの応用研究が進められたりしている段階です。現在のNISQで解ける問題の規模は限られており、量子コンピュータを使わなくても古典コンピュータで十分高速に解くことができます。

NISQの開発では、古典コンピュータと量子コンピュータを組み合わせて使う量子古典ハイブリッド・アルゴリズムが多く使われています。量子古典ハイブリッド・アルゴリズムは、量子コンピュータでビット数の少ないパラメータ付き量子回路を動作させ、古典コンピュータで、そのパラメータを最適化するという