

倉重 佑輝

京都大学大学院理学研究科
特定准教授

量子-古典空間分離法を用いた量子多体系ソルバーの開発

§ 1. 研究成果の概要

量子-古典空間分離法において、量子コンピュータを用いて解くことを想定した量子表現空間の問題を高効率に解くための量子多体系ソルバーを開発した。量子コンピュータを用いた量子多体系ソルバーのアルゴリズムとしては、量子フーリエ変換を用いた位相推定法が高効率な量子アルゴリズムとして提案されているが、エラー訂正が完全には整備されていないニアタームの量子コンピュータへの実装は困難と考えられる。よって代替として、量子フーリエ変換を伴わない反復位相推定法と、さらに全く補助量子ビットを必要としない変分量子固有値ソルバーを開発し、効率を古典コンピュータに実装された量子シミュレータを用いて検証した。特に、後者の変分量子固有値ソルバーはニアタームの量子コンピュータへの実装が最も期待される手法であるが、解の探索空間を波動関数モデルとしてあらかじめ規定しパラメータ化する必要がある。従来の変分量子固有値ソルバーでは古典コンピュータで用いられる標準的な手法から類推した波動関数モデルが採用されている

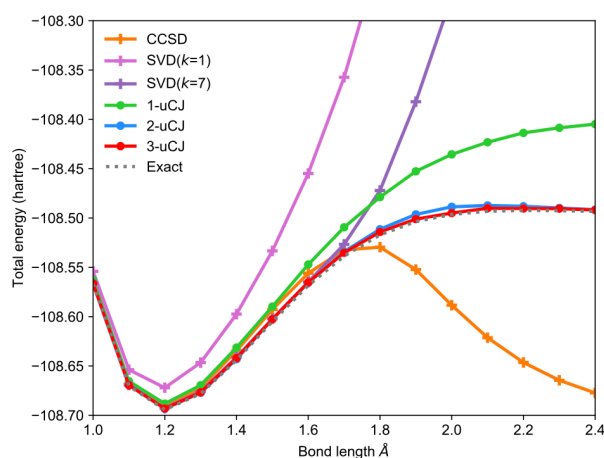


図 1 窒素分子の解離曲線。uCJ 法の指数演算子を 2 回作用させる 2-uCJ(青実線)は厳密解(黒点線)とよく一致した

が、量子コンピュータで用いるにはパラメータの数が多すぎて量子回路が長くなりすぎること、また指数部分の演算子の非可換性から厳密な実装が困難であるという2つの問題があった。そこで、両方の問題を同時に解決する新たな波動関数モデル(UCJ: unitary Cluster-Jastrow)を開発し数値実験により精度と効率を検証した。図1は本手法を、一般に記述の困難な三重結合解裂をともなう窒素分子の結合解離に適用した結果であり、uCJ 波動関数により高精度に厳密解が再現される

ことを示すことができた。