

革新的な量子情報処理技術基盤の創出
2019 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書

水上 渉

大阪大学 量子情報・量子生命研究センター
准教授

計算化学のフロンティアを拓く革新的複素数波動関数量子シミュレータの開発

§ 1. 研究成果の概要

量子化学計算は量子コンピュータの有望な応用先と見られており、現在様々な研究がおこなわれている。その中で本研究では、古典コンピュータに比べて優位を発揮しやすいと予想される複素数波動関数があらわれる問題に焦点を当てたアルゴリズム開発をおこなっている。本年度は、相対論的量子化学計算に対する変分量子固有法 (VQE) の計算手法の開発・拡充に取り組んだ。昨年度までに、相対論的量子化学計算において、複素数があらわれることとスピン対称性が崩れることから、ハミルトニアンや Ansatz の疎性が失われる問題に直面した。そこで、これを軽減するための手法の開発に取り組んだ。相対論的ハミルトニアンでは非相対論の場合と比べて、失われる対称性があるが活用できる対称性もある。それは、時間反転対称性である。この対称性を利用した波動関数 Ansatz として、Kramers-Restricted UCCSD (KR-UCCSD) を提案し、実装をおこなった。KR-UCCSD により必要なパラメータ数を、精度を落とさずに、半分に削減することができた。これは複素数の導入による計算コストの増大 (量子回路の Depth の増大) を相殺するものとなっている。さらに、相対論的量子化学計算に強い磁場をかけることで、時間反転対称性が崩れた電子状態についても、VQE をおこなえるようにした。

上述の複素数波動関数が現れる量子化学の問題への VQE の拡張に加えて、本年度は NISQ を使った VQE 計算では不可避な、ノイズや統計誤差といった課題の検証にも着手した。前者については、2019 年度に開発した UCCD2 を使うことで、これまで無視されてきた高いエネルギーを持つ分子軌道を含めたケースについて、ノイズの影響を調査した。その結果、高いエネルギーを持つ分子軌道を考慮するほどノイズの影響が大きくなることが明らかとなった。また、後者については、計算基底を使ってハミルトニアンの期待値を計算することで、統計誤差を減らす方法を開発した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Variational quantum simulation for periodic materials”, Phys. Rev. Research 4, 013052 (2022)
- 2) “Universal noise-precision relations in variational quantum algorithms”, arXiv:2106.03390
- 3) “Quantum expectation value estimation by computational basis sampling”, arXiv:2112.07416