

革新的な量子情報処理技術基盤の創出  
2020 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書
------------------

土持 崇嗣

神戸大学 大学院システム情報学研究科  
准教授

多様な電子状態計算を実現する包括的量子アルゴリズムの開発

## § 1. 研究成果の概要

新規量子アルゴリズムの提案において、得られる量子状態の対称性や量子数を考慮することは計算コストの削減や計算精度の観点から極めて重要であるものの、一般的な量子ゲート操作においてスピン対称性を満たすことは本質的に困難である。本年度は、変分量子回路を逐次的に構築していく量子-古典ハイブリッドアルゴリズムにおいて、スピン射影演算子の導入によって正しいスピン状態の保存のみならず、変分パラメータ数及び量子回路の短縮が可能になり、強電子相関系に対して有効に作用することを実証した。比較的強い電子相関を持つオゾンに対して構造最適化を行い、スピン対称性の破れが構造予測の大幅な悪化につながることを突き止めた。こうした問題は本提案アルゴリズムによって正しく改善されることが示された。

量子-古典ハイブリッドな虚時間発展アルゴリズムにおいて、古典演算に置いて指数関数的なコスト増加を回避する手法を提案するなど、様々な改良を提案してきた。特に本年度では、従来用いられてきた古典計算における処理の誤りを指摘し、修正アルゴリズムでは大幅な収束性改善を得ることに成功した。また、励起状態を計算する新規な量子アルゴリズムについて理論提案とシミュレーションによる実証を行った。

さらに、多体展開によって定量的な相関効果を取り入れる手法を発展させた。最適化された変分パラメータを固定し、外部空間を接続する変分量子回路を系統的に取り扱うことで、強電子相関系に対しても精度良く近似する結果を得た。

また、上記のような量子アルゴリズムのシミュレーションを高速に実行するプログラムパッケージはこれまで存在していなかった。そこで本研究では新規な計算ライブラリ「Quket」を独自に開発した。他のライブラリと比較してもはるかに高速な計算を可能にすることに成功し、量子化学アルゴリズム開発に対して加速度的な進展が期待できる。