

革新的な量子情報処理技術基盤の創出  
2020年度採択研究代表者

2022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

## 研究成果の概要

本年度は、アダプティブに量子回路を生成する ADAPT-VQE アルゴリズムのさらなる拡張を目指した。スピン対称性を復元することで量子回路の深度に対して分子構造や物性の予測精度が大きく改善することを確認し、フェルミ粒子系における低深度な量子回路を実現するためのスピン射影の重要性を示した。また、NISQ で実現可能な量子回路を想定し、ADAPT-VQE を数ステップで打ち切った不正確な量子状態に対して、ユニタリ結合クラスターを近似展開したものを古典計算機で後処理するための理論定式化及びその実装を行った。量子ビットで直接記述される限られたヒルベルト空間の量子状態に対する後処理による精度向上について一定の成果が得られた。

ヘシアン正定値条件の緩やかな準ニュートン法である Symmetric Rank 1 法を用いて、非 *aufbau* な励起電子配置から出発し直接励起状態を記述する最適化手法を開発した。本手法は、直交条件が必要な従来手法よりも低深度量子回路を持ち、またより素早い収束によって、多くの場合初期状態を優位に含む励起状態が安定的に求まる。特に、高エネルギー状態を低コストに可能性のあることがわかった。

量子シミュレータ QuKet を拡張してノイズモデルを導入し、これをもちいて量子虚時間発展アルゴリズムのノイズシミュレーションを行った。想定以上にエラーが大きく、NISQ ではエラーミティゲーションが必須であることが確認できた。

任意の初期状態に対して $\omega$ だけエネルギーシフトしたハミルトニアン $H(\omega)$ の逆べき乗を繰り返し演算していくことで $\omega$ に最も近い励起状態を求める量子逆べき乗アルゴリズムの開発に着手した。まずハミルトニアン $H(\omega)$ の逆べき乗を時間発展演算子の線形結合で近似する手法の適用を試みたが、条件数が大きくなると非常に長い $t$ の実時間発展を正確に行う必要があり、事実上実用は困難であることを確認した。そこで、特定の状態に対して逆べき乗状態を生成する量子回路をアダプティブに決定するアルゴリズム開発に着手した。

### 【代表的な原著論文情報】

1) Takashi Tsuchimochi, Yoohee Ryo, Seiichiro L. Ten-no, and Kazuki Sasasako, "Improved Algorithms of Quantum Imaginary Time Evolution for Ground and Excited States of Molecular Systems", *Journal of Chemical Theory and Computation* 19, 503-513 (2023). DOI:

10.1021/acs.jctc.2c00906

2) Takashi Tsuchimochi, Masaki Taii, Taisei Nishimaki, and Seiichiro L. Ten-no, "Adaptive construction of shallower quantum circuits with quantum spin projection for fermionic systems", *Physical Review Research* 4, 033100 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevResearch.4.033100