

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

曾田 繁利

理化学研究所 計算科学研究センター
技師

量子計算機による量子ダイナミクス研究に向けた技術基盤の創出

研究成果の概要

2022年度は、NISQ上でより長時間の量子多体系の実時間シミュレーションを実現することを目的に直交多項式展開法の量子-古典ハイブリッドアルゴリズムの開発を行なった。ゲート型量子計算機では、時間発展演算子に対し鈴木-トロッター分解を用いることにより量子多体系の実時間シミュレーションを実行することが可能である。その際、鈴木-トロッター分解による誤差は特にNISQで長時間シミュレーションを実行する際に困難が生じると考えられる。そこで、本研究課題では鈴木-トロッター分解に依らない量子多体系の実時間シミュレーションの手法として直交多項式展開法による手法の開発に取り組んだ。直交多項式展開法では、特殊関数としてルジャンドル多項式を採用した場合、時間発展演算子は球ベッセル関数を係数として展開される。本研究での開発として、まず、古典計算機での計算と同様に特殊関数の満たす三項漸化式を用いた手法の開発に取り組んだ。この三項漸化式では、ハミルトニアンとルジャンドル多項式の次数に対応したベクトルの積が現れ、古典計算機による計算においても最も計算コストを要する部分である。この行列・ベクトル積について、符号に対応する大域的位相を得る補助量子ビットを導入することで、量子回路により結果を得ることを可能にした。本手法による結果は、古典計算機による精密計算と良い一致が得られた。また、スワップテストを応用し求める物理量の期待値をベースとした直交多項式展開法の開発にも取り組んだ。この手法による結果は、これまでのところサンプルに対する統計誤差により高次の展開が困難であり低次の展開に限定されるため、実行可能な時間は限定される。そこで、これまでに開発した時間分割による手法と合わせて用いることで長時間のシミュレーションが可能となる。また、2020年度に開発した量子ダイナミクスシミュレータによる応用研究による成果を論文等で報告している。

【代表的な原著論文情報】

1) “Glassy dynamics of the one-dimensional Mott insulator excited by a strong terahertz pulse”, *Physical Review Research* **4**, L032019 (2022).