

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 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

2. 個人研究者名

土持 崇嗣（神戸大学大学院システム情報学研究科 准教授）

3. 事後評価結果

本研究では、エラー耐性のない Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ) コンピュータを量子化学計算に応用する際に現れる問題点を解決することを目的とした。特に、強電子相関、励起状態、小規模量子計算の結果から大規模計算の結果を抽出する量子-古典融合に着目した。

強相関系に対しては、変分量子回路 (VQE) において、ある状態に対してエネルギー寄与の大きい回路をアダプティブに選択し更新する手続きである ADAPT-VQE の改良を行った。特に、スピン対称性を満足するような射影演算子を導入することによって量子回路の大幅な短縮に成功している。このことは量子化学計算におけるスピン対称性の重要性を示すものとして重要な知見である。

励起状態の解析においては、主に虚時間発展を用いた計算アルゴリズムの開発を行った。特に、従来標準的に用いられてきた Motta らによる線形方程式の導出に誤りがあることを独自の考察から見出し、修正を行ったことは重要な成果である。さらにこの知見を利用した励起状態の計算アルゴリズムを複数提案し、古典コンピュータでは難しい励起状態の計算の改良に寄与した。

また、多体展開法などの技法によりポストプロセッシングを用いた量子科学計算の補正についても検討し、アルゴリズム実装を自動化するプログラムを開発した。

さらに、本研究で考案した種々のアルゴリズムを包括的に扱うシミュレータ「Quket」を開発し、オープンソースとして公開している。このことは NISQ 及び early FTQC (Fault-Tolerant Quantum Computer) における量子化学計算の普及発展に貢献するものとして評価する。今後、原理的な考察を行いながら量子化学計算アルゴリズムのさらなる改良を行い、将来の FTQC につながる成果を得ることを期待したい。

研究成果は 4 件の原著論文、国際会議の招待講演 4 件と国際的にも認知されている。また、さがけ期間中に神戸大学大学院システム情報学研究科 講師から同准教授に昇任している。