

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 量子-古典空間分離法を用いた量子多体系ソルバーの開発

2. 個人研究者名

倉重 佑輝（京都大学大学院理学研究科 准教授）

3. 事後評価結果

本研究は近い将来実現されると考えられる 100 論理量子ビットクラスの NISQ を利用した分子、分子集合体の量子化学的計算を可能にする手法の開発を目標として構想された。そのために量子と古典の計算空間を分離し、量子部分の効率的なソルバーを開発した。さらに、分離された量子と古典空間の間の相互作用を取り込む手法にも取り組んだ。

前者については量子変分固有値解法 (VQE) について、量子系を表現する量子回路 (Ansatz) を、準粒子変換を導入することで新たに考案し、実装と検証を行った結果、短い量子回路を用いても十分な近似精度が得られることを示した。さらに、初期状態に古典計算機で準備可能なエンタングルメント状態を用意することによって VQE に必要な量子計算の反復数を削減できることを示した。後者の量子-古典空間分離については、平均場近似を改良するために古典計算機によるポストプロセッシングを用いて量子-古典間の相関を取り入れる方法とプリプロセッシングによって量子計算に対する有効ハミルトニアンを構築して量子計算に必要な観測回数を削減する方法を開発した。さらに、実問題に適用するために必要な量子空間の表現をコンパクトにする方法やテンソル分解による観測回数の削減などを提案している。地道ではあるが着実な成果があがっており、当初の目標は達成されていると評価できる。

研究費は主にシミュレーションのための大容量メモリを用いた並列計算機に充てられ、効率的に研究が推進された。また、研究補助者を雇用して計算データの解析を行うことにより、研究者が本来の手法開発に注力することができた。本研究者は既に研究室を主催しているが、研究補助者と指導する学生を含めた研究プロジェクトの運営は効果的に行われている。

量子化学への量子コンピュータの応用は有望視されているが、実際に適用する場合に近未来に実現が見込まれる規模の NISQ では洗練された古典コンピュータによる計算に対して優位性を持つことは難しいことがわかりつつある。このような状況において、実際に量子コンピュータで効率的に計算を行う手法を開発していくことが重要である。本研究の成果である新しい Ansatz はさきがけ内の研究者だけでなく、海外の研究者もフォローしており、量子コンピュータによる量子化学計算に対する貢献は大きい。また、本プロジェクトで開発された有効ハミルトニアンの方法など、量子計算を効率化するための手法は今後 100 論理量子ビットを実装した量子コンピュータが出現した際、それらを有効に活用する手段となることが期待できる。

今後は、さらなる効率的な計算手法の開発を続けるとともに、量子コンピュータの優位性を実証・活用するための社会的なインパクトのある計算ターゲットの探索を行うことも期待したい。

なお、本研究者は当プロジェクト期間中に京都大学大学院理学研究科特定准教授から京都大学大学院理学研究科化学専攻准教授に昇任した。