

量子コンピュータを用いる量子モンテカルロ法の改良

Improving Quantum Monte Carlo Method Using Quantum Computer

阪大 QIQB¹, TOPPAN デジタル² °吉田 悠一郎¹, Luca Erhart¹, 室越 拓真¹, 中川 理夢²,
森 千紘², 水上 渉¹

Osaka Univ.¹, TOPPAN Digital Inc.², °Yuichiro Yoshida¹, Luca Erhart¹, Takuma Murokoshi¹,
Rika Nakagawa², Chihiro Mori², Wataru Mizukami¹

E-mail: yoshida.yuichiro.qiqb@osaka-u.ac.jp

量子コンピュータの開発が近年急速に進められており、量子多体系の物理現象のシミュレーションは、量子コンピュータの応用先として有望視されている。その中で、多電子系の基底状態計算のための量子アルゴリズム開発が盛んに行われてきている。近年 Huggins らによって、量子コンピュータを援用して計算を行う量子・古典ハイブリッド量子モンテカルロ (QC-QMC) 法が開発された[1]。彼らは、最大 16 量子ビットまでを使用した量子計算と、それに続く量子モンテカルロ計算により、窒素分子やダイヤモンドの基底状態のエネルギーの計算を、従来型コンピュータによる高精度計算に匹敵する精度で実行している。こうした状況の中で我々は、QC-QMC 法を改良し、よりスケラブルな形で QC-QMC 法を行う方法を開発した。

提案手法を使って計算した水素分子のエネルギー曲線を図 1 に示す。cc-pVDZ 基底関数を使用し、活性空間は(2e, 2o)とした。図 1 には、量子コンピュータ実機ではなく、シミュレータを使用した計算結果を示している。我々の QMC 計算の結果は、Full CI (FCI) 法の結果を非常によく再現している。一方で、活性空間 VQE の結果は電子相関の取り込みが十分でないことがわかる。本手法を他の分子に適用した結果及び、量子コンピュータ実機を使用した結果については当日報告する。

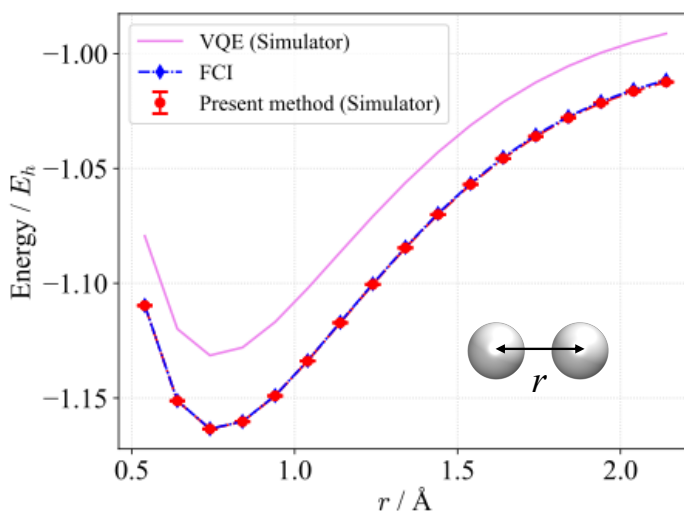


FIG. 1 Energy curve for H₂ molecule.

Reference:

- [1] W. J. Huggins, B. A. O’Gorman, N. C. Rubin, D. R. Reichman, R. Babbush, J. Lee, Nature **603**, 416–420 (2022).