

確率的虚時間発展法に基づく分子構造最適化のための 量子アルゴリズム

小杉太一

量子コンピュータを利用した計算のために現在広く採用されているのは変分アルゴリズムであり、量子回路を特徴づけるパラメータを古典コンピュータ上で最適化する手法である。このような回路（変分回路）のための様々な改良と拡張が提案されているが、どれも基本的には変分回路が想定する範囲内でしか量子状態を最適化できない。その一方で、我々は最近、古典コンピュータの併用を前提としない一般的な非変分アルゴリズムとして確率的虚時間発展法(Probabilistic Imaginary-Time Evolution, PITE)を提案している[Kosugi et al., Phys. Rev. Research 4, 033121 (2022)]。変分アルゴリズムとは異なり、PITE は真の量子最適化を実行できるのが特長の一つである。特に第一量子化形式での量子化学計算においてその威力が発揮される。本発表においては事前の古典計算とそれを用いた量子計算における計算量のスケールリングの観点から、第一量子化形式が有望であることを詳細に説明した。また原子核配置の符号化のためのレジスターを導入することにより、PITE に基づいて分子構造の最適化を実行できることを我々は最近見出した。これに基づく新手法の提案を紹介し、電子自由度と原子核自由度の両方において量子優位性の実現が可能であることを示した。