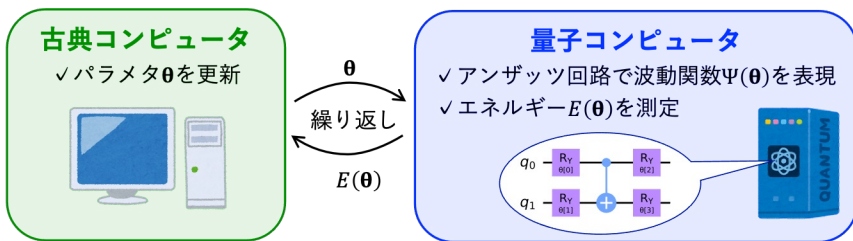


変分量子固有値ソルバーにおける波動関数補正法の開発 — VQEによる電子状態計算の精度向上戦略の構築 —

後町 慈生(慶應義塾大学大学院)

変分量子固有値ソルバー(VQE)

- ✓ 量子コンピュータによる電子状態計算に利用
- ✓ 実際に実行すると、様々な誤差要因により
化学的に必要な精度(1 kcal/mol)の達成は容易でなく、適切な計算条件が必要



プロジェクトの目的

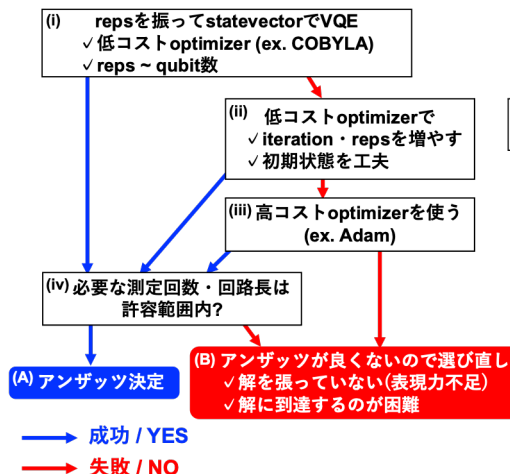
VQE計算の精度向上

アプローチ

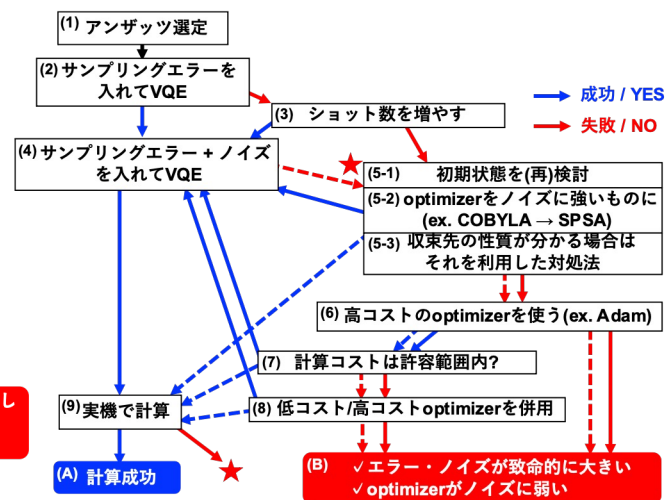
VQE誤差は様々な要因の結果であり、精度の改善には計算条件のどこを直したら良いか必ずしも明らかでない

→ VQE誤差を診断し、適切に対処する**計算戦略を構築**

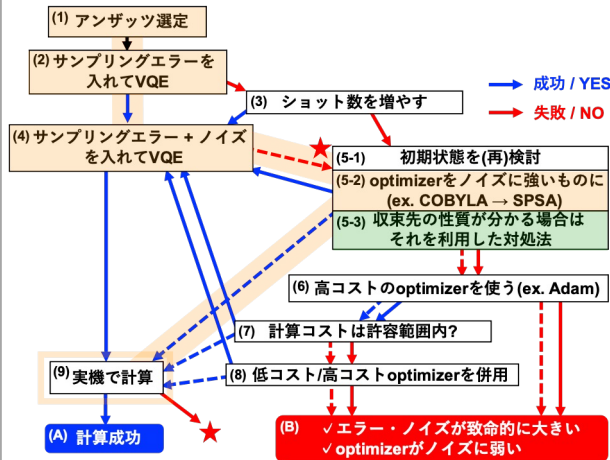
✓ statevector計算戦略 (ノイズ・エラーなし)



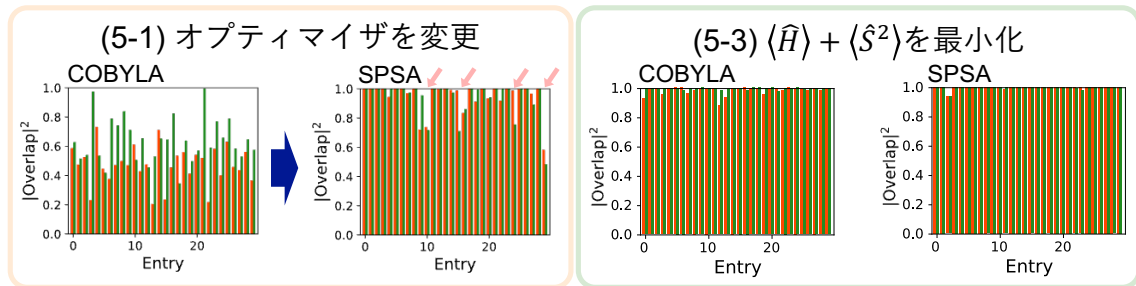
✓ ノイズ・エラー対処戦略



プロジェクト成果の活用例：エチレン分子(2 qubit)の計算



- ✓ 計算戦略に沿って、枠内の指示に従ってVQE計算
- (4)で計算失敗
- (5-2)オプティマイザの変更で概ね精度が向上するも、一部の計算には誤差が残る
- (5-3)誤差の性質を調べて対処することで、さらに精度向上



✓ エラー・ノイズ存在下で良い精度を与える計算条件を発見

- ✓ 計算戦略により、VQE計算の誤差に対して**計算条件のどの部分を見直せば良いかが明確に**
 - 特に量子コンピュータによる計算を新規に始めようとする場合に有用
- ✓ このような計算の失敗に関する知見は研究成果として共有されづらいため、本プロジェクトの成果を活用することで効率的な精度向上が可能
- ✓ 本プロジェクトに関連するコードは https://github.com/hatanaka-lab/IPA_mitouTG にて公開