

# 量子多体系の実時間発展シミュレーションプログラムの開発 —量子位相推定による量子化学計算のエッセンスを気軽に体験する—

## 1. 背景

ゲート式量子コンピュータはその性質のため、量子化学や量子物性などの、計算機を用いた量子多体系の性質の解明を目標とする学問分野への応用が期待されている。ゲート式量子コンピュータを量子多体系の計算に活用するアルゴリズムとして、現在までに位相推定や変分量子固有値ソルバーをはじめとする様々なアルゴリズムが研究・開発されてきているが、それらの成果の多くは量子計算・量子アルゴリズムを主な専門とする研究者の手によるものである。一方で、多くの量子化学の専門家にとっては、量子コンピュータを活用した量子化学計算は、（量子コンピュータの性能がここ数年で急激に向上したこともあり）未だになじみ深いものではない。今後ますます実用性を重視した量子アルゴリズムの開発が加速するであろうことを考えると、量子アルゴリズムに関する知識をもつ量子化学者が増えることは重要になっていくと考えられる。

## 2. 目的

背景で述べた観点から、「量子化学計算に活用しうる量子アルゴリズム」を量子化学を専門とする人々の間に普及させることは、解決すべき課題であると考えた。本プロジェクトは、量子化学計算に活用しうる量子アルゴリズムの一つである量子位相推定アルゴリズムに着目し、このアルゴリズムとそれを活用した量子化学計算の方法を量子化学ユーザーへ普及させることを目的として、実施したものである。

## 3. ソフトウェア開発内容

### ・本ソフトウェアで解決する課題

本プロジェクトは、化学を専門とする人々に対する、量子位相推定アルゴリズムを用いた量子化学計算に関する知識の普及を促進することを目的として実施したものである。化学を専門とする人々が量子コンピュータを活用した量子化学計算を気軽・簡単に試行できるソフトウェアが存在すれば、この目的の達成のために大いに役立つと考えられる。本プロジェクトでは、そのようなソフトウェアの開発を行った。このソフトウェアにより「既存のポピュラーな量子化学計算ソフトウェアと同様のインターフェイス」で、「量子アルゴリズムに関する事前知識を必要とせず」に量子位相推定による分子ハミルトニアン固有エネルギーの推定を試行することができる。ユーザーはこのソフトウェアの使用を通じ、量子位相推定による固有エネルギーの推定に関する基本的な知識を得ることができる。また、本ソフトウェアは容易に拡張できる形式となっているため、ある程度の知識・技術を持つユーザーが自ら新規な表式のハミルトニアンや量子回路を追加し、既存のものと比較することもできるようになっている。これらの特徴により本ソフトウェアは、本プロジェク

トの目的である、「化学を専門とする人々への量子位相推定アルゴリズムによる量子化学計算に関する知識の普及」を実現する一助となるはずである。

・動作環境

Python3が使用できる環境

・機能と構成

ユーザーは分子構造と対象とする電子状態の性質（電子数・スピン多重度・対称性等）を記載した入力ファイル（図1）を用意する。入力ファイルを引数としてPythonインタプリタを実行する（図2）ことで出力ファイルが出力される。

```
from pyscf import gto
mol = gto.Mole()
mol.basis = "sto-6g"
mol.verbose = 0
mol.spin = 0
mol.atom = [["Li", (0.0, 0.0, 0.0)],["H", (0.0, 0.0, 1.5)]]
mol.build()

import freqerica
result = freqerica.kernel(mol, norb=5, nelec=2)
```

図1. 入力ファイルの例 (sample.py)

```
$ python example.py
```

図2. 開発したソフトウェアの実行例

出力ファイルはhtml形式の文書であり、実行されたシミュレーションの詳細と、固有エネルギーの推定結果を表す図表からなる。（図3）

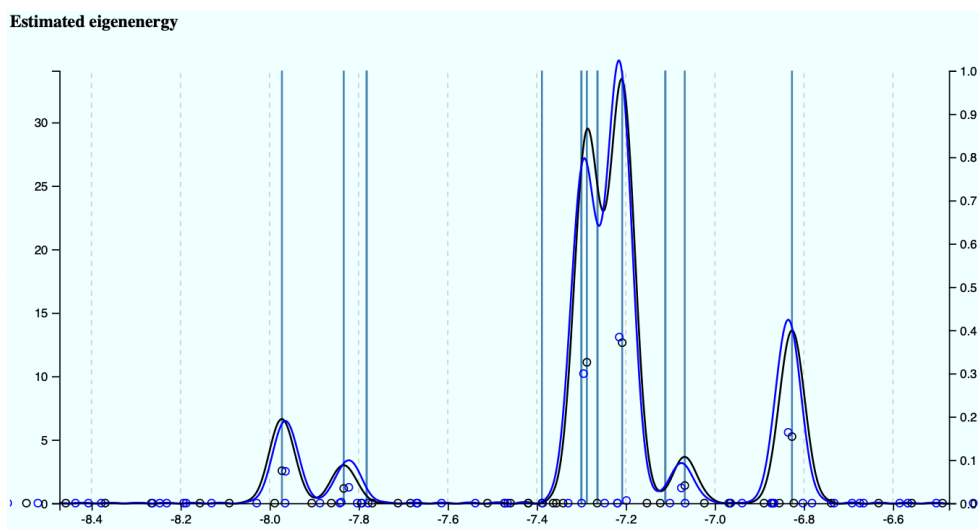


図3. 出力ファイルの例 (result.html、エネルギーの推定結果部分)

なお、本ソフトウェア内部での処理の流れは図4のようになっている。

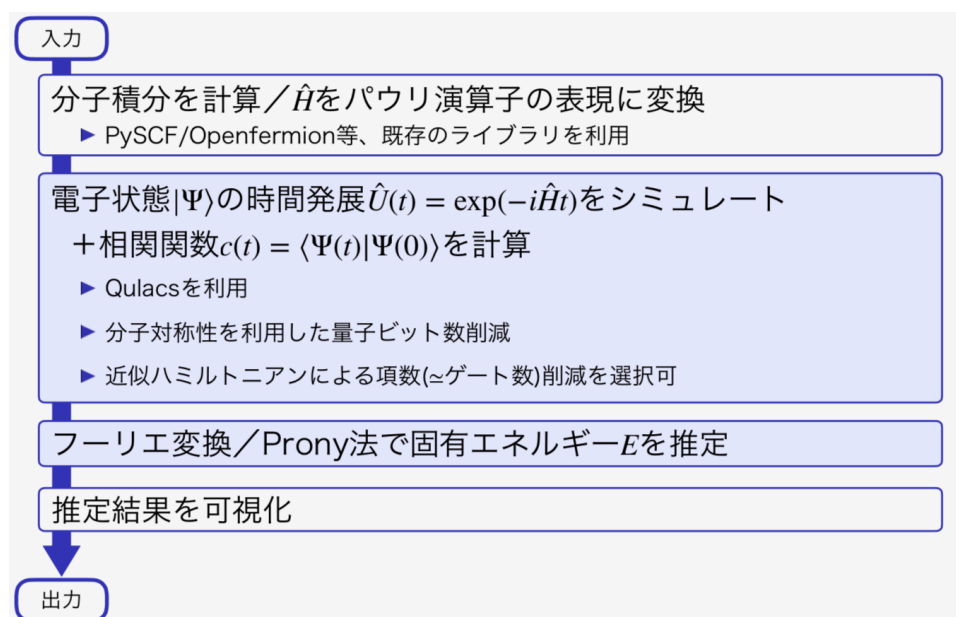


図4. ソフトウェア内部での処理

#### 4. 新規性・優位性

本ソフトウェアは「分子構造等、(古典コンピュータを用いた従来の)量子化学計算と同様の簡潔な入力」を与え、「1行のコマンドを実行するだけ」で「固有エネルギーの推定を行い、結果を可視化して出力する」という特徴をもつ。現在のところ、これらの点を備えたソフトウェアは他に公開されていない。

#### 5. 期待されるユーザー価値と社会へのインパクト

##### ・期待されるユーザー価値

本ソフトウェアは、量子コンピュータに関する事前知識を持たなくとも、量子化学計算に馴染みのあるユーザーであれば容易に導入・実行ができるように設計されている。そのため、量子化学計算に普段から触れており、量子コンピュータを活用した量子化学計算への関心もあるが、知識はあまり持っていない層(近年の急激な量子コンピュータの性能向上と量子計算への関心の高まりにより、そのような層のボリュームは大きくなっていると思われる)が初めて量子位相推定による固有エネルギー推定に触れ、基本的なアルゴリズムを理解するためのエントリーポイントとして本ソフトウェアを活用することができる。具体的には、関連分野のゼミ等での活用や、関心を持つ個人が趣味の一環として使用することを想定している。

また、本ソフトウェアは、ユーザー自身が容易にアルゴリズムを拡張できるように設計されている。そのため、基本的な知識を持つユーザーであれば、改良されたアルゴリズムを実装することで、従来手法と新手法の精度・計算コスト等を比較するための簡便な方法として本ソフトウェアを使用することもできる。

- ・ 社会へのインパクト

本ソフトウェアの利用が拡大することによる社会への利益としては、背景でも述べたとおり、量子コンピュータを活用した量子化学計算に関する知識を持つ層が増えることにより、今後の量子アルゴリズム開発がさらに加速されることがあげられる。

## 6. 氏名 (所属)

松澤 優太 (京都大学理学研究科 修士2回生)

### (参考) 関連URL

githubリポジトリ : <https://github.com/ymtz03/fregerica>