Vol.2020-QS-1 No.10
2020/10/16

位相推定アルゴリズムを用いた分子のエネルギー計算にかかるコストの推定

小林　望[1,4]　御手洗　光祐[2,3]　中川　裕也[4]

概要：誤り訂正量子コンピュータでの実行が期待されている位相推定アルゴリズムは, 量子化学や物性物理などで現れる sparse なハミルトニアンの固有エネルギーを高速に計算可能であり, 物質設計や化学反応予測を通して様々な社会課題への実応用が期待されている. そのような応用を考えていく上で, 実用的な問題に対して位相推定アルゴリズムの計算コストがどの程度必要になるかを推定することは非常に重要である. 本研究では, 位相推定アルゴリズムを用いた分子のエネルギー計算に必要な計算コストを推定し, 様々な分子の入力に応じて予想計算コストを出力するプログラムを作成した. この計算コストは量子計算に伴う種々のエラー量の関数として与えられるが, 入力分子に依存するエラーとしてトロッター分解に伴うものがコストに大きく寄与する. 大きな分子ではこのエラーを直接計算することは難しいため, 我々は [1] に従いモンテカルロ法を用いて推定を行った. さらに考える分子系と欲しい精度を与えたとき, 上記の計算コストの推定を制約条件付き最適化問題とみなすことで, 欲しい精度を満たすようにエラー量を最適化し全体の計算コストを推定するプログラムの実装を行った.

1. イントロダクション

近年, 量子計算分野の目覚ましい発展に伴い量子コンピュータへの社会的な関心が高まっている. 量子コンピュータを用いた高速な計算アルゴリズムのうち, 様々な社会課題への応用が最も期待されているものの一つが位相推定アルゴリズムである. 位相推定アルゴリズムは, 現在実現しつつある Noisy Intermediate-Scale Quantum device (NISQ デバイス) と呼ばれる誤り訂正機能を持たない量子コンピュータでの実行は難しいと考えられるものの, 対応する古典計算アルゴリズムと比べて指数的に高速であることがほぼ確実視されており, 将来的に誤り訂正ありの量子コンピュータが実現した際のキラー・アプリケーションとして注目を集めている [2].

位相推定アルゴリズムの適用先として注目されている分野の一つが量子化学である. 量子化学では原子や分子のエネルギーを量子力学のシュレーディンガー方程式に基づき精確に計算することを目標とするが, 古典コンピュータによる愚直な計算では必要な計算リソースが原子数の増加に伴い指数関数的に増加してしまう. そのため, シュレーディンガー方程式に基づいた第一原理的な量子化学の計算を金属錯体や酵素などの産業応用上で重要な分子系に適用するのは困難である. 一方, 誤り訂正ありの量子コンピューター上で動作する位相推定アルゴリズムを用いると, 量子化学計算に必要な計算リソースは原子数に対して多項式程度になり, 古典アルゴリズムに対して指数的な加速が得られる. 量子化学計算による精確な分子エネルギーの計算を大規模な系で行えるようになると, 素材開発や化学合成など広範囲な産業応用が期待でき, 社会的インパクトが非常に大きい. そこで, 誤り訂正ありの量子コンピュータが将来実現された時に備え, 具体的にどの程度の大きさの分子でどの程度の計算リソースが必要になるのかを見積もっておくことは重要である.

本研究では, 先行研究である [1] に従い様々な分子について位相推定アルゴリズムを用いた際の計算コストの推定を行った. 2 章ではまず位相推定アルゴリズム及びこれに伴う誤差の評価と計算コストの見積もり方法について解説を行う. そしてこれらの手法を実際の分子に適用した結果を 3 章で示す. 最後に 4 章では今後の展望について議論する.

2. 手法

本章ではまず位相推定アルゴリズムについて簡単に紹介した後に, それを分子のエネルギー計算にどのように適用するかを説明する. 続いて位相推定アルゴリズムを実際の量子コンピュータに実装する際にトロッター分解と呼ばれ

[1] 東京大学大学院理学系研究科
[2] 大阪大学大学院基礎工学研究科
[3] 大阪大学先導的学際研究機構量子情報・量子生命研究センター
[4] 株式会社 QunaSys

ⓒ 2020 Information Processing Society of Japan

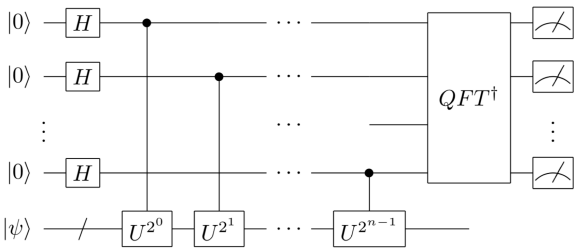


図 1 位相推定アルゴリズムで用いる量子回路. 図中の QFT は量子フーリエ (逆) 変換を表す.

る近似を用いるが, この近似にかかる誤差の見積もりを行う. 最後にトロッター分解以外の誤差量についても考慮した上で分子のエネルギー計算にかかる計算コストの見積もりを行う. この計算コストは上述の種々の誤差量に依存する関数となるが, これをどのようにして最小化するかを解説する.

2.1 位相推定アルゴリズム

位相推定アルゴリズム (Quantum phase estimation; QPE) は, n 量子ビット上のユニタリ演算子 U の固有値 $e^{i2\pi\phi}$ を量子コンピューター上で求めるアルゴリズムである (詳細は [3] を参照されたい). まず, ユニタリ演算子 U の固有状態 $|\psi\rangle$ として $U|\psi\rangle = e^{i2\pi\phi}|\psi\rangle$ を満たすものを量子コンピュータ上に用意する. 厳密な固有状態 $|\psi\rangle$ を量子コンピュータ上に用意することは簡単ではないが, 所望の (固有値 $e^{i\phi}$ をもつ) 固有状態と十分大きな重なりをもつ状態を $|\psi\rangle$ として用意できれば, 位相推定アルゴリズムは問題なく動作することが知られている. この状態 $|\psi\rangle$ に対し新たに補助 qubit を t 個付け加え, **図 1** のような量子回路を作用させることで, 量子コンピュータ上の状態は次のように変化する:

$$|\psi\rangle\,|0\rangle^{\otimes t} \xrightarrow{QPE} |\psi\rangle\,|\tilde{\phi}\rangle\,. \tag{1}$$

ここで $\tilde{\phi} = \phi_1\phi_2\cdots\phi_t$ は ϕ を 2 進数表示した際に t 桁目まで展開したビット列である (2 進数展開が t 桁で終わらない場合は補正が入る):

$$\phi = 0.\phi_1\phi_2\cdots\phi_t := \sum_{i=1}^{t}\phi_i 2^{-i},$$
$$\phi_i = 0,1 \quad (i = 1,\ldots,t).$$

つまり, 位相推定アルゴリズムは状態 $|\psi\rangle$ の固有値の 2 進数表示を, 補助ビットに転写するアルゴリズムである. 図 1 の量子回路を作用させた後, 補助 qubit を測定すれば固有値の 2 進数表示が取り出せることになる.

2.2 位相推定アルゴリズムによる分子のエネルギー計算

前節で紹介した位相推定アルゴリズムは, エルミート演算子 H の固有値計算にも用いることができる. すなわち, ユニタリ演算子 e^{-iHt_0} に対して位相推定アルゴリズムを用いれば, H の固有値 E が $\phi = Et_0$ として得られる (t_0 は適当な定数). 量子化学ではハミルトニアン H というエルミート演算子の固有値が分子のエネルギーを与えるので, 計算したい分子のハミルトニアン H に対して $U = e^{-iHt_0}$ を量子コンピュータ上で実装し, 位相推定アルゴリズムを用いることで分子エネルギーを求めることができる.

$U = e^{-iHt_0}$ の具体的な実装方法は数通り提案されている [4–8] が, 本研究ではトロッター分解に基づく次の方法を考える. まず, 量子化学における分子のハミルトニアンは第二量子化形式で書き下すことが出来ることに注目する:

$$H_f = \sum_{ij} h_{ij}c_i^\dagger c_j + \sum_{ijkl} h_{ijkl}c_i^\dagger c_j^\dagger c_k c_l. \tag{2}$$

ここで $c_i^\dagger, c_i$ は i 番目のスピン軌道に対する電子の生成消滅演算子であり, フェルミオンの反交換関係 $\{c_i, c_j\} = c_ic_j + c_jc_i = 0, \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0, \{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij}$ を満たす. 考慮するスピン軌道の総数 n が, 量子コンピュータで用いる量子ビット数 n に対応する. また, 展開係数 h_{ij}, h_{ijkl} は古典コンピュータによる計算 (多くの場合, ハートリーフォック分子軌道間の積分) で決定される. さらに, フェルミオンで書かれたハミルトニアンを, Jordan-Wigner 変換 [9] 等の手法を用いて n 量子ビット上のパウリ演算子 $P_\alpha \in \{I, X, Y, Z\}^{\otimes n}$ の和に変換する:

$$H = \sum_{\alpha=1}^{L} c_\alpha P_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{L} H_\alpha. \tag{3}$$

ここで c_α は実係数であり, $H_\alpha = c_\alpha P_\alpha$ とおいた. ここで, 式 (2) とフェルミオン演算子 1 つが $O(1)$ 個のパウリ演算子に変換されるという性質より, 項数 L が高々 $O(n^4)$ 程度であることに注意されたい. そして 2 次のトロッター分解

$$e^{-iHt_0} = \left(\prod_{\alpha=1}^{L} e^{-iH_\alpha dt/2} \prod_{\alpha=L}^{1} e^{-iH_\alpha dt/2}\right)^R + O(t_0^3/R^2) \tag{4}$$

を使い, $U = e^{-iHt_0}$ を近似的に実装する. すなわち, 個々のゲート $e^{-iH_\alpha} = e^{-ic_\alpha P_\alpha}$ はパウリ演算子 P_α を生成子とする回転ゲートであり, $O(n)$ 個の CNOT ゲートと 1 量子ビットゲートで実装できるので [3], その $O(n^4)$ 個程度の積として U が実装できる. ここで時間ステップ分割数 $R = t_0/dt$ はトロッター数と呼ばれ, トロッター数が無限大の極限もしくは $dt \to 0$ の極限でこの分解は厳密になる. 時間 t_0 を一定にとるとき, 時間刻み dt を小さくすることで演算子の近似の精度は上がるが, トロッター数がその分大きくなってゲート数 (計算コスト) が増大するトレードオフが存在する.

以上のように, 位相推定アルゴリズムを用いて分子のエネルギー計算を行うには, まず時間発展演算子を式 (4) の

ように分解した後で, それぞれの回転ゲートを誤り訂正可能な (保護された) ゲートセットへ分解して実装することになる. 以降では, まずトロッター分解に起因するエラーを解説し, その後に他のエラーも考慮したアルゴリズムの最終的な精度と計算コストの関係を紹介する.

2.3 トロッター分解による誤差の見積もり

前小節で見たように, トロッター分解を用いることで時間生成演算子を量子コンピュータ上で実装することが可能となるが, 信頼できる定量的な計算を行うためにはこの近似によるエネルギー計算の系統誤差を把握する必要がある. $\prod_{\alpha=1}^{L} e^{-iH_\alpha dt/2} \prod_{\alpha=L}^{1} e^{-iH_\alpha dt/2}$ を $e^{-iH_{\rm eff}t_0}$ とおいたとき, ハミルトニアンの差分 $H - H_{\rm eff}$ は分割幅 dt の最低次で

$$-\frac{1}{12}\sum_{\alpha\le\beta}\sum_{\beta}\sum_{\alpha'<\beta}\left[H_\alpha\left(1-\frac{\delta_{\alpha,\beta}}{2}\right),[H_\beta,H_{\alpha'}]\right]dt^2 + O(dt^3) \tag{5}$$

と与えられる [10]. この表式から, 位相推定アルゴリズムをトロッター分解した時間発展演算子に対して適用した場合の, ハミルトニアンの固有エネルギーの誤差の上限は,

$$\begin{aligned}\Delta E_{\rm TS}/dt^2 &\le 4\sum_{\alpha,\beta,\alpha'}\|H_\alpha\|\,\|H_\beta\|\,\|H_{\alpha'}\| \\ &\quad\times\left(\delta_{\alpha>\beta}\delta_{\alpha'>\beta}+\delta_{\beta>\alpha}\delta_{\alpha',\alpha}\right)W(\alpha,\beta,\alpha') \\ &= \sum_{\alpha,\beta,\alpha'}\Gamma(\alpha,\beta,\alpha')\end{aligned} \tag{6}$$

と求められる [1]. ここで $W(\alpha,\beta,\alpha')$ は (5) 中の二重交換子が可換でない時に 1, 可換なときに 0 を返す関数である.

式 (6) の右辺はおよそ $O(L^3)=O(n^{12})$ の非常に多数の項の和となっており, 特に大きな qubit 数 n が必要な巨大な分子では直接の数値的評価は難しい. そこで, [1] ではモンテカルロ法を用いた右辺の値の推定を提案している. 具体的には M 個の一様ランダムな 1 から L までの整数の組 $\{\alpha_j,\beta_j,\alpha'_j\}$, $j=0,\cdots M$ を用いて

$$\Delta\tilde{E}_{\rm TS}/dt^2 = \frac{L^3}{M}\sum_{j=1}^{M}\Gamma(\alpha_j,\beta_j,\alpha'_j) =: h \tag{7}$$

を計算し, 式 (6) の右辺の推定値とする. 以上より, 欲しい近似精度 $\epsilon_{\rm TS}$ が与えられた時にトロッター分解の幅 dt として

$$dt = \sqrt{\frac{\epsilon_{\rm TS}}{h}} \tag{8}$$

と取れば十分であることが分かる.

2.4 位相推定アルゴリズムを用いた計算コストの推定

最後に, 具体的な量子誤り訂正アルゴリズムを念頭に, 位相推定アルゴリズムを用いた分子のエネルギー計算におけるトロッター分解以外に起因する誤差を紹介し, 全体の誤差が一定以下になるよう要求した際の計算コストについて解説する.

本稿では誤り訂正アルゴリズムとして [1] に従い surface code を考える. surface code を用いた場合, Clifford ゲートは非常に少ない実装オーバーヘッドで済むものの T ゲート・Toffoli ゲートなど non-Clifford なゲートには非常に大きな実装コストがかかる. これは surface code では Clifford ゲートの実行が自然に (transversal に) 可能であるのに対して, T ゲートは魔法状態蒸留と呼ばれる手法を用いなければならないことに起因している. 魔法状態蒸留は Clifford な操作のみを用いて十分に高い purity の補助的な「魔法状態」を「蒸留」し, その状態を用いて T ゲート操作を元の qubit 系で実現するものであるが, この「蒸留」操作が計算リソースの大半を占めるという結果もある [11]. 故に, 位相推定アルゴリズムを surface code を用いて実装した場合, 全体の計算コストの中で T ゲートの数が支配的な寄与をすると考えられる. そこで, ここでは位相推定アルゴリズムの実装に必要な T ゲートの数を計算コストとみなすことにする.

さて, トロッター分解以外に起因する誤差としては, (i) 位相推定アルゴリズムで補助ビットの数 t を有限にとったことによる誤差 (ii) トロッター分解した時間発展演算子 (式 (4)) を誤り訂正可能な量子ゲートに分解した時の誤差, の 2 つが考えられる. よって, (i) による誤差を ϵ_1, トロッター分解による誤差を $\epsilon_2=\epsilon_{\rm TS}$, (ii) による誤差を ϵ_3 と置き, 要求する精度を ϵ とおくと

$$\epsilon_1+\epsilon_2+\epsilon_3\le\epsilon \tag{9}$$

が満たされるべき条件である. ここでは, 精度 ϵ として化学精度 (chemical accuracy) である $\epsilon = 0.1{\rm mHa} = 10^{-4}{\rm Ha}$ をとる. 化学精度は, 量子化学においてエネルギーの計算誤差の基準として用いられているものであり, 化学精度程度の計算精度があれば室温における物質の安定性の予想や化学反応の予測ができる. 3 つの誤差 $\epsilon_1,\epsilon_2,\epsilon_3$ についてそれぞれ詳細な検討を行いその誤差に応じたゲート数を見積もり, アルゴリズム全体の実装に必要な T ゲートの総数を求めると

$$\begin{aligned}&C(\epsilon_1,\epsilon_2,\epsilon_3)\\ &= 2L\left\lceil\frac{\alpha}{\epsilon_1}\right\rceil\left\lceil\beta\sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_2}}\right\rceil\left(\gamma\log_2\left(\frac{2L}{\epsilon_3}\left\lceil\beta\sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_2}}\right\rceil\right)+\delta\right)\end{aligned} \tag{10}$$

となる [1]. ここで L はハミルトニアンの項の数, α は位相推定アルゴリズムに依る定数, β は $\epsilon_2 = 0.1{\rm mHa}$ とした時

のトロッター数, γ, δ はユニタリ演算子を T ゲートに分解するアルゴリズムに依る定数である.

我々の目標はこのコスト関数 C を制約条件 (9) を満たすように誤差の大きさ $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3$ を調節しつつ最小化することである. しかしながら,(10) の形のままではこの最小化問題を解くことは難しいため, 次の関数に近似したものを考える:

$$\tilde{C}(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3) = 2L\frac{\alpha}{\epsilon_1}\beta\sqrt{\frac{\epsilon}{\epsilon_2}}\left(\gamma \log_2\left(\frac{2L\beta}{\epsilon_3}\right) + \delta\right) \quad (11)$$

従って, 次の制約条件付き最小値問題を解けば良い:

$$\min_{\epsilon_1,\epsilon_2,\epsilon_3} \tilde{C}(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3), \quad (12)$$

$$\text{s.t. } g(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3) = \epsilon_1 + \epsilon_2 + \epsilon_3 - \epsilon \leq 0. \quad (13)$$

この最小値問題の局所解は, KKT(Karush-Kuhn-Tucker) 条件 [12,13] と呼ばれる必要条件を満たす. 今回の場合 KKT 条件は次の条件式を満たす実数 λ が存在することに等しい:

$$-\vec{\nabla}C(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3) = \lambda\vec{\nabla}g(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3) \quad (14)$$

$$\lambda g(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3) = 0,\ \lambda \geq 0,\ g \leq 0 \quad (15)$$

(15) より

(1) $\lambda = 0$ かつ $g(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3) < 0$

(2) $\lambda > 0$ かつ $g(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3) = 0$

の 2 つの場合が考えられるが, (14) を具体的に書き下すと前者を満たす有限の $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3$ は存在しないことがわかるため後者のみを考えればよい. この場合には ($\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3$ は以下の方程式群の解として与えられる:

$$\epsilon_1 = 2\epsilon_2, \quad \epsilon_2 = \frac{\epsilon - \epsilon_3}{3} \quad (16)$$

$$\epsilon_3 + 3\frac{\epsilon}{2\gamma}(\delta \log 2 + \gamma \log(\frac{2M\beta}{\epsilon_3})) - \epsilon = 0 \quad (17)$$

(17) は解析的にあらわに解くことは出来ないが, 数値的に解くことは可能である. よって定数 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ が与えられれば, 計算コストを近似的ではあるが最小化するような $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3$ を数値的に求めることが出来て, それらを式 (10) に代入することで計算コストを実際に推定することが可能である.

以上が, [1] に基づく計算コストの推定方法の解説である.

3. 結果・考察

前章の手法を踏まえ, 本研究ではまず様々な分子に対して $\epsilon_2 = \Delta E_{\mathrm{TS}} = 0.1\mathrm{mHa}$ となる時のトロッター数 (式 (10) の β) をモンテカルロ法を用いて計算した. 計算を行った分子については**表 1** にまとめた. 分子ハミルトニアンの作成には計算ライブラリ PySCF [14] と OpenFermion [15] を用いた. モンテカルロ法のサンプル数 M は十分計算が収束すると考えられる $M = 10^8$ に取った. 得られたトロッター数を分子系の qubits 数に対してプロットを行ったものが**図 2** である. ここからトロッター数 β と qubits 数 N の間には $\beta = O(N^{2.30\cdots})$ のべき則を見てとることができる. [1] では $\beta = O(N^{2.5})$ であったが, 近い値が再現されている (トロッター数 β の厳密な値は各分子の詳細に依存するため, フィッティングはあくまで目安を与えるものであることに注意).

表 1 今回用いた分子, 使用した基底関数, 必要な qubit 数.

molecule	basis	qubits	molecule	basis	qubits
HF	sto-6g	12	CO_2	sto-6g	30
NH_3	sto-6g	16	CO_2	sto-3g	30
CH_4	sto-6g	18	H_2O	dzvp	36
HCl	sto-6g	20	NH_3	dzvp	40
F_2	sto-6g	20	CH_4	dzvp	44
H_2S	sto-6g	22	CO_2	p321	54
C_2H_2	sto-6g	24	C_2H_4	dzvp	72
H_2O	p321	26	H_2O	p6311ss	72
C_2H_4	sto-6g	28	CO_2	dzvp	84

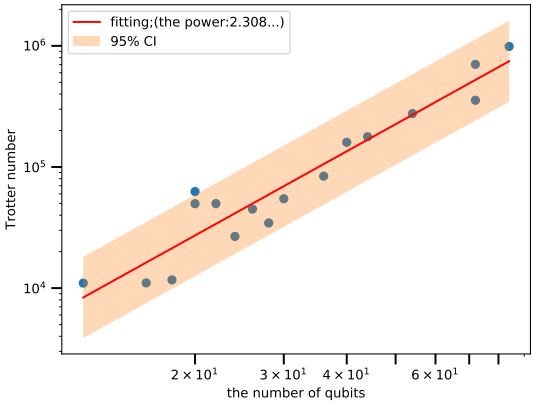


図 2 表 1 の分子について, ハミルトニアンの qubit 数と $\epsilon_2 = 0.1\mathrm{mHa}$ とした時のトロッター数のプロット. 橙色で塗られた部分は両対数グラフで直線フィッティングを行った際の 95 % 信頼区間を表す.

次にこれらのトロッター数を用い, コスト関数つまり T ゲートの数の見積もり及び最適化を行った. この際, コスト関数の中に含まれる定数を指定する必要がある. ここでは特に二つの可能性を考えた. ひとつはそれぞれのコストについて厳密に示されている上限の値を用いる場合である (rigorous と呼ぶ). もう一つはゲートセットへの分解と位相推定アルゴリズムについては経験的に知られているコストの値を用いる場合である (empirical と呼ぶ). それぞれの場合に用いた定数は**表 2** にまとめた. これらの 2 つの場合に各種分子に対して推定を行った T ゲートの数 (コスト関数の最小値) は**図 3** の様になった. トロッター数の場合と同様に経験的なべき則を読み取ることが出来るが, 今回の実験では T ゲートの数 $= O(N^{6.29\cdots})$ となった. 予想されるように rigorous の場合では empirical と比べて T ゲートの数が O(10) 程度増えているものの, どちらの場合でも非常に大量のゲートセットを用意しなければならないことが

表 2 コスト関数評価に用いた各種定数.

	α	γ	δ
rigorous	8π	4	11
empirical	$\pi/2$	1.15	9.2

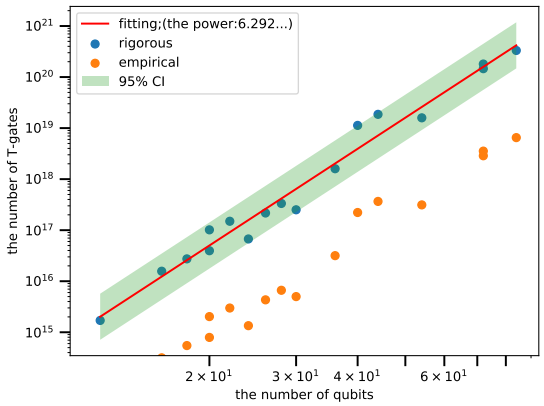


図 3 表 1 の分子について, 図 2 の結果を基にコスト関数の最小値の推定を行った結果. 緑色の領域は図 2 と同様に rigorous の場合に両対数グラフで直線フィッティングを行った際の 95 % 信頼区間.

分かる.

最後に, アルゴリズムの実行時間について述べる. これまでの解析では計算コストを T ゲートの個数を用いて評価していたが, 実際のアルゴリズムの実行時間はこのゲート数に T ゲートひとつあたりの実行時間をかければ見積もることができる. [1] と同様に, この実行時間を 10 ns という非常に高速な値に仮定しても, qubit 数が 20 程度で計算時間が数年単位になってしまうことが図 2 から分かる. しかし今回のコストの見積もりに用いたトロッター数 (式 (8)) は誤差 ϵ_{TS} を実現する上限値であり, 小さな分子で同様の誤差が生じるトロッター数を直接見積もるとこの上限値よりも $O(10^5)$ 程度小さくなることがわかっている. ゆえに, 全体の計算時間の見積もりも $O(10^{-5})$ 倍程度小さい値となり, アルゴリズムの実行時間が現実的な時間スケールに近づくことが予想できる. 本研究はあくまで最も愚直なコストの見積もりであり, 工夫を行ったより現実的な計算コストの見積もりに関しては今後の課題としたい.

4. 展望

本研究では [1] に沿って位相推定アルゴリズムによる分子のエネルギー計算にかかる計算コストの推定を行った. 計算コストに最も寄与する, トロッター分解に起因する誤差評価ならびに必要なトロッター数の計算を様々な分子に対して行った. そして, その他の要因による計算コストも考慮した全体の計算コストを合計の T ゲート数として, 全体の誤差が化学精度を満たすという条件のもとでの計算コストの最小値の見積もりを行った.

今後の展望としては, [1] で他に述べられている計算の効率化手法を取り入れたコスト推定プログラムの実装や, 本年 8 月に発表された [16] で用いられている qubitization と呼ばれる手法を基にしたコスト推定の実装があげられる. こうした最新の知見や計算コストの改善提案を取り入れつつ, 誤り量子訂正コンピュータが完成した際の産業応用の一助になるようなプログラムを今後整備していく予定である.

謝辞 本研究 (の一部) は，内閣府総合科学技術・イノベーション会議の戦略的イノベーション創造プログラム (SIP)「光・量子を活用した Society 5.0 実現化技術」(管理法人:量研) によって実施されました.

参考文献

[1] Reiher, M., Wiebe, N., Svore, K. M., Wecker, D. and Troyer, M.: Elucidating reaction mechanisms on quantum computers, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, Vol. 114, No. 29, pp. 7555–7560 (2017).
[2] Aspuru-Guzik, A., Dutoi, A. D., Love, P. J. and Head-Gordon, M.: Simulated quantum computation of molecular energies, *Science*, Vol. 309, No. 5741, pp. 1704–1707 (2005).
[3] Nielsen, M. A. and Chuang, I.: Quantum computation and quantum information (2002).
[4] Suzuki, M.: Fractal decomposition of exponential operators with applications to many-body theories and Monte Carlo simulations, *Physics Letters A*, Vol. 146, No. 6, pp. 319–323 (1990).
[5] Low, G. H.: Hamiltonian simulation with nearly optimal dependence on spectral norm, *Proceedings of the 51st Annual ACM SIGACT Symposium on Theory of Computing*, pp. 491–502 (2019).
[6] Childs, A. M. and Wiebe, N.: Hamiltonian Simulation Using Linear Combinations of Unitary Operations, *Quantum Info. Comput.*, Vol. 12, No. 11–12, p. 901–924 (2012).
[7] Low, G. H. and Chuang, I. L.: Optimal Hamiltonian Simulation by Quantum Signal Processing, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 118, p. 010501 (online), DOI: 10.1103/PhysRevLett.118.010501 (2017).
[8] Low, G. H. and Chuang, I. L.: Hamiltonian Simulation by Qubitization, *Quantum*, Vol. 3, p. 163 (online), DOI: 10.22331/q-2019-07-12-163 (2019).
[9] Jordan, P. and Wigner, E.: Über das Paulische Äquivalenzverbot, *ZPhy*, Vol. 47, No. 9-10, pp. 631–651 (1928).
[10] Poulin, D., Hastings, M. B., Wecker, D., Wiebe, N., Doberty, A. C. and Troyer, M.: The trotter step size required for accurate quantum simulation of quantum Chemistry, *Quantum Information & Computation*, Vol. 15, No. 5-6, pp. 361–384 (2015).
[11] Fowler, A. G., Mariantoni, M., Martinis, J. M. and Cleland, A. N.: Surface codes: Towards practical large-scale quantum computation, *Physical Review A*, Vol. 86, No. 3, p. 032324 (2012).
[12] Kuhn, H. W. and Tucker, A. W.: Nonlinear Programming, *Proceedings of the Second Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*, Berkeley, Calif., University of California Press, pp. 481–492 (online), available from ⟨https://projecteuclid.org/euclid.bsmsp/1200500249⟩

ⓒ 2020 Information Processing Society of Japan

(1951).
[13] Karush, W.: Minima of functions of several variables with inequalities as side conditions., PhD Thesis, Thesis (S.M.)–University of Chicago, Department of Mathematics, December 1939. (1939).
[14] Sun, Q., Berkelbach, T. C., Blunt, N. S., Booth, G. H., Guo, S., Li, Z., Liu, J., McClain, J. D., Sayfutyarova, E. R., Sharma, S., Wouters, S. and Chan, G. K.-L.: PySCF: the Python-based simulations of chemistry framework, *WIREs Computational Molecular Science*, Vol. 8, No. 1, p. e1340 (online), DOI: 10.1002/wcms.1340 (2018).
[15] McClean, J., Rubin, N., Sung, K., Kivlichan, I. D., Bonet-Monroig, X., Cao, Y., Dai, C., Fried, E. S., Gidney, C., Gimby, B. et al.: OpenFermion: the electronic structure package for quantum computers, *Quantum Science and Technology* (2020).
[16] von Burg, V., Low, G. H., Häner, T., Steiger, D. S., Reiher, M., Roetteler, M. and Troyer, M.: Quantum computing enhanced computational catalysis (2020).

ⓒ 2020 Information Processing Society of Japan