

quantum_computer_79_93

書いた人: twitter@taxfree_pyton

[参考にしている本](#)

量子アルゴリズム

量子アルゴリズムとは

量子コンピュータは n 個の qubit を使って 2^n 個の並列計算ができるが、これだけだと 2^n 個の状態のうちどれか 1 つが確率振幅に応じて確率的に得られるだけで、高速に計算できるとは言えない。従って、測定によって欲しい答えが得られる確率を高めることができるような工夫が必要で、このような工夫を量子アルゴリズムという。

量子アルゴリズムの代表例として、Shor's algorithm, HHL algorithm, Grover's algorithm などである。これらのアルゴリズムはここ最近の量子コンピュータで完全に実行できることはできない(大規模な誤り耐性量子コンピュータが実現されていないから)が、NISQ 量子コンピュータでも一部分は実行でき、その考え方を理解することは非常に重要である。

素因数分解(Shor's algorithm)

素因数分解とは

素因数分解問題は整数 N が与えられたときに N の 1 ではない約数を見つける問題のことで、 $3001 = 31 \times 97$ などである。素因数分解問題は N の桁数が大きくなると非常に難しくなり、現状で最もよいアルゴリズムである一般数体ふるい法(General Number Field SieveGFNS)でも準指数的・超多項式時間のアルゴリズムであり、多項式時間で解くことができる古典アルゴリズムは見つかっていない。

位数発見問題とは

一般に、素因数分解問題は位数発見問題に帰着させて解く。位数は、整数 N を法とする共通の因数をもたない整数 $x(x < N)$ に対し

$$x^r \bmod N = 1$$

を満たす最小の整数 r である。特に冪剰余と呼ばれる

$$f(a)_{x,N} := x^a \bmod N$$

という剰余演算(N を法とした x の a -冪剰余)は、 a が与えられたもとの $f(a)_{x,N}$ の値を計算するのは易しいが、逆の $f(a)_{x,N}$ の値が与えられたもとの指数 a を計算するのは難しいという性質(一方向性)を利用して暗号理論の分野でも広く利用されている。この難しい方の問題である与えられた N と x から a を求める問題は離散対数問題と呼ばれ、問題サイズに対して多項式時間の古典アルゴリズムは発見されていない。

$a(= 0, 1, \dots)$ を引数とした冪剰余 $f_{x,N}(a) := x^a \bmod N$ の計算について考える。mod 関数の性質から

$$\begin{aligned} f_{x,N}(a+1) &= (x^a \cdot x) \bmod N = ((x^a \bmod N) \cdot (x \bmod N)) \bmod N \\ &= (f_{x,N}(a) \cdot f_{x,N}(1)) \bmod N \end{aligned}$$

とできるから、大きなべき乗を計算する必要はない。また、 $\bmod N$ の値は高々 N 通りしかないので $f_{x,N}(a+1)$ は x と N が互いに素でなくても周期を持つ。

位数の定義より、 r が偶数のとき

$$(x^r - 1) \bmod N = 0 \rightarrow (x^{r/2} + 1)(x^{r/2} - 1) \bmod N = 0$$

と変形できるから、 $(x^{r/2} \pm 1) \bmod N = 0$ であるか、または $x^{r/2} + 1$ と $x^{r/2} - 1$ が N と非自明な公約数をもつかのどちらかである。従って、偶数の位数 r を発見できれば $x^{r/2} + 1$ か $x^{r/2} - 1$ と N との公約数から N の因数を計算でき、これを繰り返すことで N を小さな因数への分解でき、最終的に素因数分解問題を解くことができる。

以上のことを踏まえると、位数を用いて素因数分解を行うアルゴリズムのプロセスは以下である。

1. 素因数分解したい整数 N と互いに素な整数 x を用意する(*1)
2. $a(= 0, 1, \dots)$ を引数とした剰余 $f_{x,N}(a) := x^a \bmod N$ を計算する
3. $f_{x,N}(a)$ の周期 r (=位数)を見つける(r が奇数なら 1. に戻る (*2))
4. $p = \gcd(x^{r/2} + 1, N)$, $q = \gcd(x^{r/2} - 1, N)$ が N の素因数

(*1) ランダムに x' を取ってきて、それが N と互いに素でなければ、 $\gcd(x', N)$ は N の約数なので $\frac{N}{\gcd(x', N)}$ に関する素因数分解問題を考える

(*2) r は複数の近似値で得られるから、その中から偶数 r を選ぶか、それでもダメな場合は 1. に戻って別の x を用いて計算し直す

位数を用いた因数分解の具体例

$N = 21$, $x = 11$ の例を考える。位数を計算すると $r = 6$ となるから位数の定義より

$$(11^3 + 1)(11^3 - 1) \bmod 21 = 0$$

である。従って、

$$\begin{aligned} p &= \gcd(11^3 + 1, 21) = 3 \\ q &= \gcd(11^3 - 1, 21) = 7 \end{aligned}$$

となり、これは $N = 21$ の素因数である。

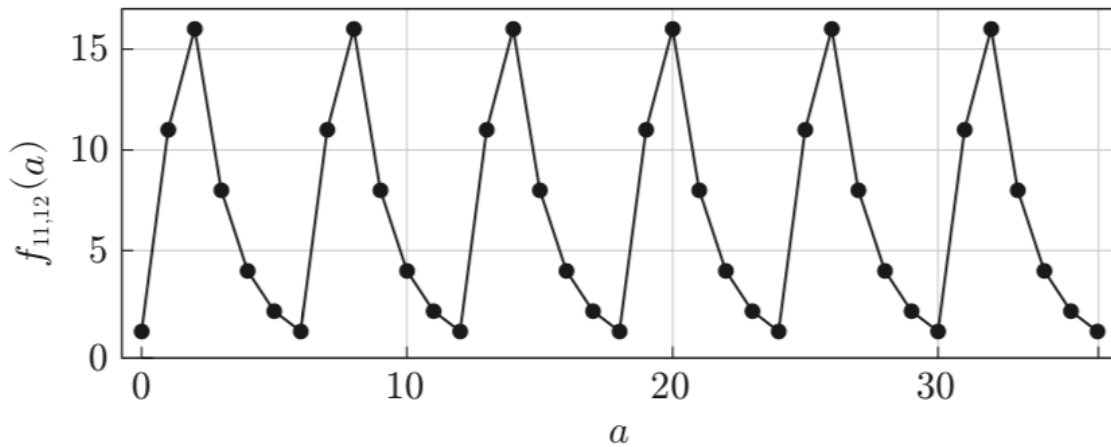


図 4.1 周期からの位数発見

量子位数発見サブルーチンの仕組み

古典コンピュータでは、ユークリッドの互除法によって最大公約数を求めるアルゴリズムの計算量は $O(\log n)$ 、位数 r を見つけるアルゴリズムの計算量は $O(\exp((\log n)^{1/3}(\ln \ln n)^{2/3}))$ と知られている。量子アルゴリズムを用いることで最も時間のかかる位数を見つける部分を指数関数的に早めることができる。位数発見サブルーチンのコアな部分は

$$U_{x,N} |\alpha\rangle = |\alpha x \bmod N\rangle$$

と変換するような x と N を引数とするユニタリ演算子 $U_{x,N}$ を考え、その固有値を取り出す位相推定アルゴリズムである。このユニタリ演算子の固有状態は $0 \leq s \leq r-1$ となる整数 s をラベルとして

$$|u_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{k=0}^{r-1} \exp(-2\pi i \frac{s}{r} k) |x^k \bmod N\rangle$$

と書き下すことができる。また、 $x^r \bmod N = x^0 \bmod N = 1$ を用いると

$$\begin{aligned} U_{x,N} \ker u_s &= \exp(2\pi i \frac{s}{r} \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{k=0}^{r-1} \exp(-2\pi i \frac{s}{r} (k+1))) |x^{k+1} \bmod N\rangle \\ &= \exp(2\pi i \frac{s}{r}) |u_s\rangle \end{aligned}$$

となるから、 $|u_s\rangle$ が固有状態で、固有値が $\exp(2\pi i \frac{s}{r})$ であることが分かる。従って、量子位相推定サブルーチンにより固有値 $\exp(2\pi i \frac{s}{r})$ を $(2L+1)$ ビット精度で決定できれば、後は連分数アルゴリズムによって $\frac{s}{r}$ に最も近い分数(有理数)を多項式時間で計算でき、収束値として得た $\frac{s'}{r'}$ から位相(の候補)となる整数 r' を得られる。ここで、 L は N のビット数 $L := \lceil \log N \rceil$ である。 $x^{r'} \bmod N$ が1になるかを確認することで r' が位数であるかを確認し、もし位数でない場合はもう一度位数発見サブルーチンを回すことになる。位数 r を発見した後は古典アルゴリズムと同じ手順で進める。以上の手続きが Shor's algorithm である。

量子位数発見サブルーチンの量子回路は下の図である。

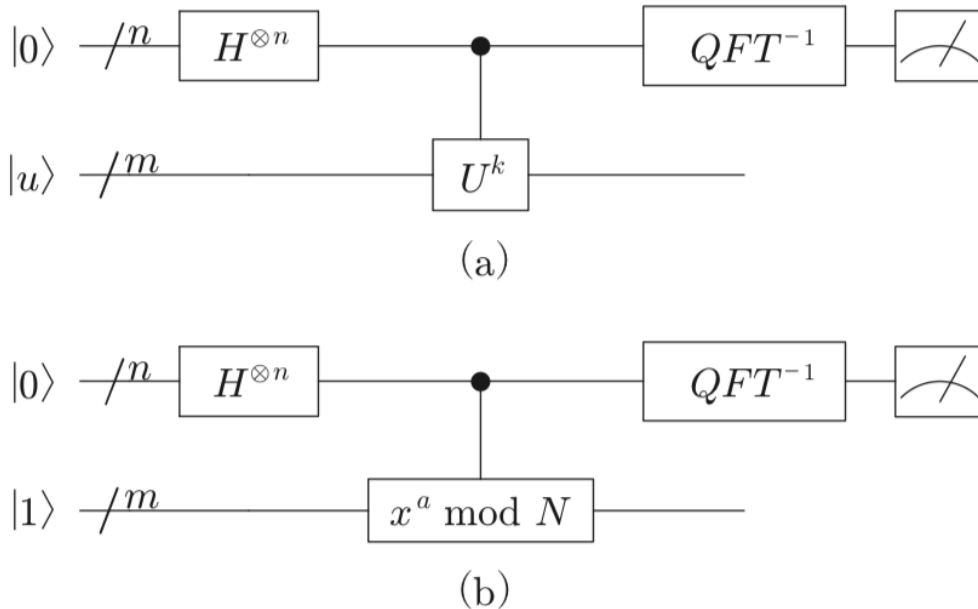


図 4.2 (a) 量子位相推定サブルーチンと (b) 位数発見サブルーチン

qubit $q_0 \sim q_t$ が第 1 レジスタに相当し、第 1 レジスタの大きさ t は、 $2L + 1 + \log(3 + \frac{1}{2\epsilon})$ ビット用意すれば、後段の $\frac{s}{r}$ の測定結果から r を推定する手続きで失敗する確率の上限を ϵ にすることができる。qubit q_{t+1} 以降は第 2 レジスタで、冪剰余計算のユニタリ演算を作用させる部分である。 N や x を量子レジスタとして用意するかどうかは補助 qubit をどの程度必要とするかなど、量子回路として実装する方法はいくつか知られていて、計算量は $O(L^3)$ である。第 1 レジスタには重ね合わせ状態で複数の a が用意され、制御ユニタリゲートとして $x^a \bmod N$ が第 2 レジスタ部にかかっている。

以上の手続きを整理すると

1. 整数 N と互いに素になる整数 x を選ぶ
2. 初期状態を準備する(第 1 レジスタ: $\frac{s}{r}$ の位相推定結果を必要な精度で収めるための t qubit で $|0\rangle$ で初期化、第 2 レジスタ: N を入力する計算用の L qubit で $|1\rangle$ で初期化)
3. 第 1 レジスタすべてに Hadamard ゲートを作用させる
4. 制御ユニタリゲート $U_{x,N}$ を作用させる
5. 第 1 レジスタに量子フーリエ逆変換を行う
6. 第 1 レジスタを測定し $\frac{s}{r}$ を得る
7. 連分数アルゴリズムを使用して位数 r を求める

となる。この流れをブラケット記法を用いて表示すると

$$\begin{aligned}
 |0\rangle|1\rangle &\xrightarrow{H} \frac{1}{\sqrt{2^t}} \sum_{a=0}^{2^t-1} |a\rangle|1\rangle \\
 &\xrightarrow{U_{x,N}} \frac{1}{\sqrt{2^t}} \sum_{a=0}^{2^t-1} |a\rangle|x^a \bmod N\rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2^t}} \sum_{a=0}^{2^t-1} \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{s=0}^{r-1} e^{\frac{2\pi i s a}{r}} |a\rangle|u_s\rangle \\
 &\xrightarrow{QFT^{-1}} \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{s=0}^{r-1} |s/r\rangle|u_s\rangle
 \end{aligned}$$

となる。ここで、量子位相推定サブルーチンの実行に用いる固有状態 $|u_s\rangle$ の準備には、求めたい位数 r を知っている必要があるが、これは位数を求める問題そのものである。従って、ここでは 1 個の固有状態 $|u_s\rangle$ を用意する代わりに

$$\frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{s=0}^{r-1} |u_s\rangle = |\mathbf{1}\rangle$$

という性質を用いて、固有状態を重ね合わせた状態として準備する。

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\sqrt{r}} \sum_{s=0}^{r-1} e^{\frac{2\pi i s a}{r}} |u_s\rangle &= \frac{1}{r} \sum_{s=0}^{r-1} \sum_{a'=0}^{r-1} e^{-\frac{2\pi i s (a'-a)}{r}} |x^{a'} \bmod N\rangle \\
 &= \sum_{a'=0}^{r-1} \delta_{aa'} |x^{a'} \bmod N\rangle \\
 &= |x^a \bmod N\rangle
 \end{aligned}$$

のように証明できる。ただし、

$$\sum_{s=0}^{r-1} \exp\left(-\frac{2\pi i s(a' - a)}{r}\right) = \begin{cases} r & (a = a') \\ \frac{1 - \exp(\frac{-2\pi i r(a' - a)}{r})}{1 - \exp(\frac{-2\pi i(a' - a)}{r})} = 0 & (a \neq a') \end{cases}$$

を用いた。

量子位数発見サブルーチンを用いた素因数の具体例

では、最初に例として出した $N = 21$, $x = 11$ の例を量子アルゴリズムを用いて考える。21 の二進数表示は 5 桁なので ($L = 5$) なので位相推定の精度 $t = 2L + 1 = 11$ とする。第 1 レジスタすべてに Hadamard ゲート操作を実行し、第 2 レジスタに制御ユニタリゲート $U_{x=11, N=21}$ を作用させると

$$\begin{aligned} |0\rangle |1\rangle &\xrightarrow{H^{\otimes 11}} \frac{1}{\sqrt{2048}} \sum_{a=0}^{2047} |a\rangle |0\rangle \\ &\xrightarrow{U_{11,21}} \frac{1}{\sqrt{2048}} \sum_{a=0}^{2047} |a\rangle |11^a \bmod 21\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2048}} (|0\rangle |1\rangle + |1\rangle |11\rangle + |2\rangle |16\rangle + \cdots + |2047\rangle |11\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2048}} \{(|0\rangle + |6\rangle + \cdots) |1\rangle + (|1\rangle + |7\rangle + \cdots) |11\rangle + (|2\rangle + |8\rangle + \cdots) |16\rangle + \cdots + (|5\rangle + |11\rangle + \cdots) |2\rangle\} \end{aligned}$$

となる。この状態で第 1 レジスタの状態を可視化できれば周期 $r = 6$ であると分かるが、第 1 レジスタの測定からはどれか 1 つが確率的に測定されるだけなので周期は分からない。第 1 レジスタを量子フーリエ逆変換すると

$$\frac{1}{2048} \sum_{a=0}^{2047} \sum_{s=0}^{2047} \exp\left(\frac{2\pi i a s'}{2048}\right) |s'\rangle |11^a \bmod N\rangle$$

と位相として出てきた周期 r に関するヒントが基底エンコードされて第 1 レジスタ部書き込まれる。ここで第 2 レジスタを測定して $|16\rangle$ だったとすると、第 1 レジスタを測定した結果が $|s'\rangle$ となる確率 $p(s')$ はボルン規則から

$$p(s') = \left| \frac{1}{2048} \sum_{a=0}^{2047} \exp\left(\frac{2\pi i a s'}{2048}\right) \right|^2 = \frac{1}{2048} \sum_{b=0}^{340} \exp\left(\frac{2\pi i (6b + 2)s'}{2048}\right) \right|^2$$

と計算できる。確率 $p(s')$ をプロットすると

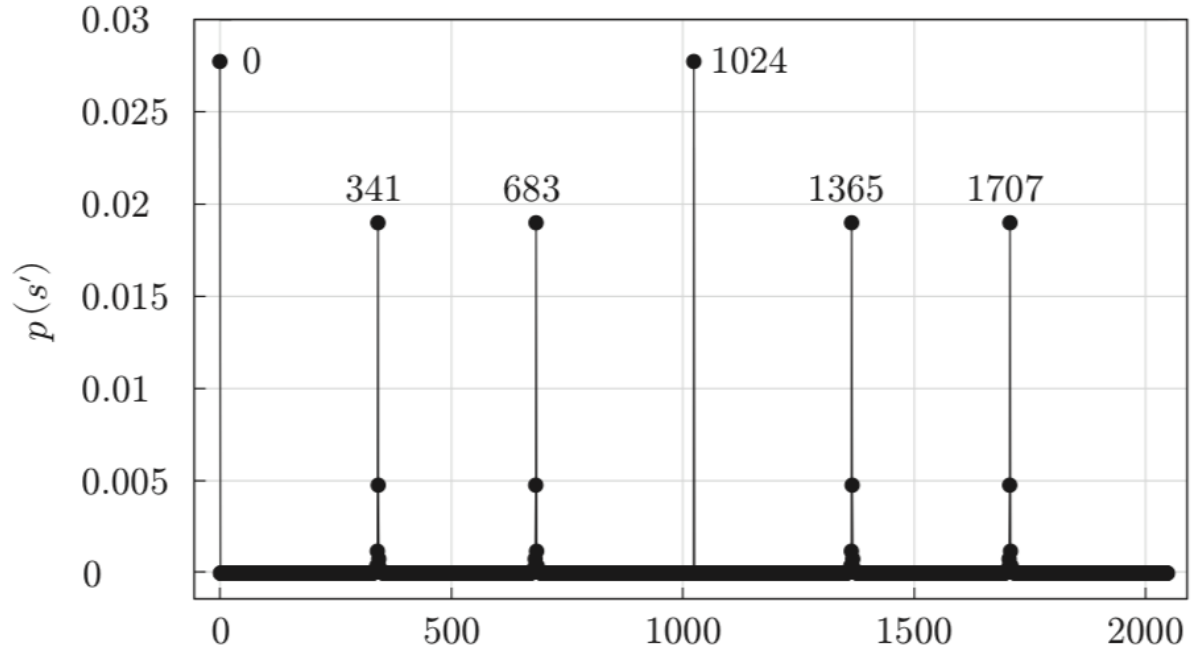


図 4.3 $|s'\rangle$ が測定される確率 $p(s')$

となり, $s' = 0, 341, 683, 1024, 1365, 1707$ が他に比べて高い確率になっていることが分かる. ここで, 例えば測定結果が $s' = 1707$ であるとする

$$\left| \frac{s'}{2^t} - \frac{d}{r} \right| = \left| \frac{1707}{2048} - \frac{d}{r} \right| \leq \frac{1}{2048}$$

となる. この結果を連分数展開すると

$$\begin{aligned} \frac{1707}{2048} &= \frac{1}{\frac{2048}{1707}} = \frac{1}{1 + \frac{341}{1707}} \\ &= \frac{1}{1 + \frac{1}{\frac{1707}{341}}} = \frac{1}{1 + \frac{1}{5 + \frac{2}{341}}} \\ &= \frac{1}{1 + \frac{1}{5 + \frac{1}{\frac{341}{2}}}} = \frac{1}{1 + \frac{1}{5 + \frac{1}{170 + \frac{1}{2}}}} \end{aligned}$$

のようになる. 従って, 近似が荒い順に取っていくと

$$\begin{aligned} \frac{d'}{r'} &\approx \frac{1}{1} = 1 \\ \frac{d'}{r'} &\approx \frac{1}{1 + \frac{1}{5}} = \frac{5}{6} = 0.833333\dots \\ \frac{d'}{r'} &\approx \frac{1}{1 + \frac{1}{5 + \frac{1}{170}}} = \frac{851}{1021} = 0.8336967\dots \end{aligned}$$

となるから, $r' = 6$ を使用する. r' が偶数なので, 古典アルゴリズムと同様に

$$\begin{aligned} p &= \gcd(11^3 + 1, 21) = 3 \\ q &= \gcd(11^3 + 1, 21) = 7 \end{aligned}$$

として 21 の素因数分解問題の解を得る．次の $r' = 1021$ は奇数なので上記の手続きを実行できず失敗となる．

量子アルゴリズムは確率的なアルゴリズムなので失敗する場合もある． $\frac{d}{r}$ の位相推定の精度による失敗のほか，深刻なものとして r と d が共通の因数をもつ場合があります．この場合には，連分数アルゴリズムによって得られる r' は r の因数で r そのものは分からなくなる．もちろん，ランダムに選んだ d が， r と互いに素に確率が高いので位数発見アルゴリズムを南海は繰り返すと高い確率で正しい $\frac{d}{r}$ が得られるであろう．この方法では $O(L)$ かかる．これより優れた方法として位相推定と連分数展開を 2 回繰り返す方法として位相推定と連分数展開を 2 回繰り返す手続きがある．1 回目と 2 回目にそれぞれ r'_1, d'_1, r'_2, d'_2 を得て， $\gcd(d'_1, d'_2) = 1$ のときには $\text{lcm}(r'_1, r'_2)$ から r を計算する．この方法で正しい r が取り出せる確率は $\frac{1}{4}$ より大きいことが分かっている．

量子化学計算

量子化学計算とは

量子化学計算は，化合物の構造や含まれる元素などの情報をもとに，電子(や原子核)の量子力学的な振る舞いを数値計算し，化合物の性質を予測する計算手法として，化合物の性質を予測する計算手法のこと．第一原理計算の方が馴染みがあるかも

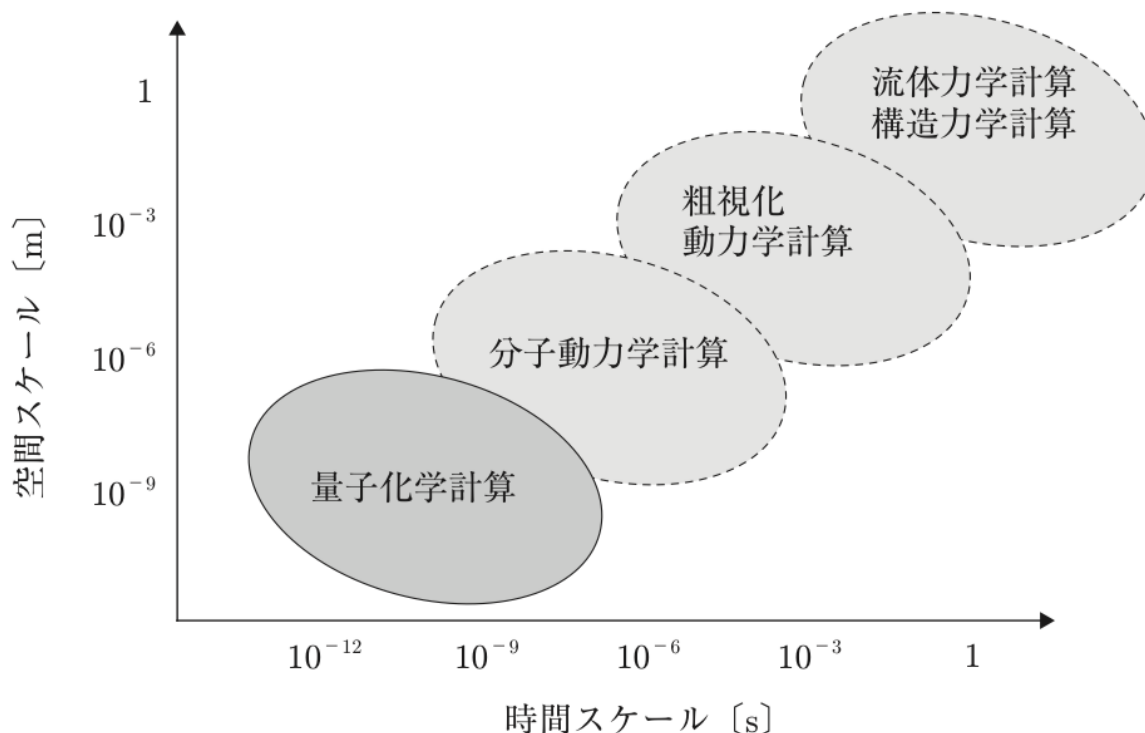


図 4.4 さまざまなシミュレーション手法

基礎方程式として，シュレディンガー方程式を使用する．特に，多くの場合，

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \mathcal{H} \Psi(\mathbf{r}, t)$$

のうち，時間 t に依存する部分を変数分離した

$$\mathcal{H} \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

を解く (= 偏微分方程式を満たす波動関数を計算する) ことに主眼を置く。

量子化学計算の嬉しさ

量子化学計算で暑かえる分子の大きさには計算リソースによる限界があるが、化合物の物性を決定する最大の要素である電子状態の解析が可能で、さまざまな物性値や反応性などを精度良く計算できるのが嬉しい。 [応用例](#)

どうやって計算するのか

考えている系は量子多体系である。Born-Oppenheimer 近似([詳しくいう説明](#))によって、原子核は \mathbf{R}_k に固定されていると考えられる。N 個の電子が M 個の(静止した)原子核の周りで運動する系の波動関数は $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ のように書いて、電子に関するハミルトニアン \mathcal{H} は

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^M \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_k e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_k|}$$

と書ける。ただし、

$$\begin{aligned} \hbar &= \text{プランク定数} \\ \epsilon_0 &= \text{真空の誘電率} \\ e &= \text{電気素量} \\ m_e &= \text{電子質量} \end{aligned}$$

で、原子番号 Z_k (原子核 k に含まれる陽子数)、原子核の位置座標 \mathbf{R}_k はパラメータである。簡単のため、[Hartree 原子単位系](#)を用いると

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \nabla^2 + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^M \frac{Z_k}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_k|}$$

と書き直せる。このハミルトニアンの各項の説明は以下である。

- 第 1 項は運動エネルギー項で、N 個の電子の運動エネルギーを合計したものである。ここで ∇^2 はラプラシアン(2 階の微分演算子)で、電子の運動量に関連している。負の符号はエネルギーが保存される系での慣例に基づいている。
- 第 2 項は電子間反発エネルギー項で、電子間のクーロン反発を表している。 e^2 は電気素量の二乗で、 $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ は二つの電子間の距離である。この項は全ての電子ペアについての反発エネルギーの合計である。
- 第三項は核-電子引力エネルギー項で、電子が原子核に引きつけられるエネルギーを表す。 e^2 は電気素量の二乗、 $|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_k|$ は電子と原子核の距離である。この項は電子と全ての原子核の間の引力エネルギーの合計である。

このハミルトニアンを持つシュレディンガー方程式を解ければ物性を精度よく予測できるが、多体の非線型偏微分方程式になっていて、解析的に解くのが難しいことが分かる。

非線形性の原因となっているのは、ハミルトニアン \mathcal{H} が電子の座標 \mathbf{r}_i の関数になっていることで、 \mathcal{H} を構築するには電子の分布に関する情報が必要になるが、それは波動関数 $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ そのものである。つまり、波動関数 $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ を解くという問題を解くために、問題の解が必要になる。

数値的に解く方法として、自己無撞着法(Self-Consistent Field, SCF)が一般的に用いられる。計算プロセスは以下である。

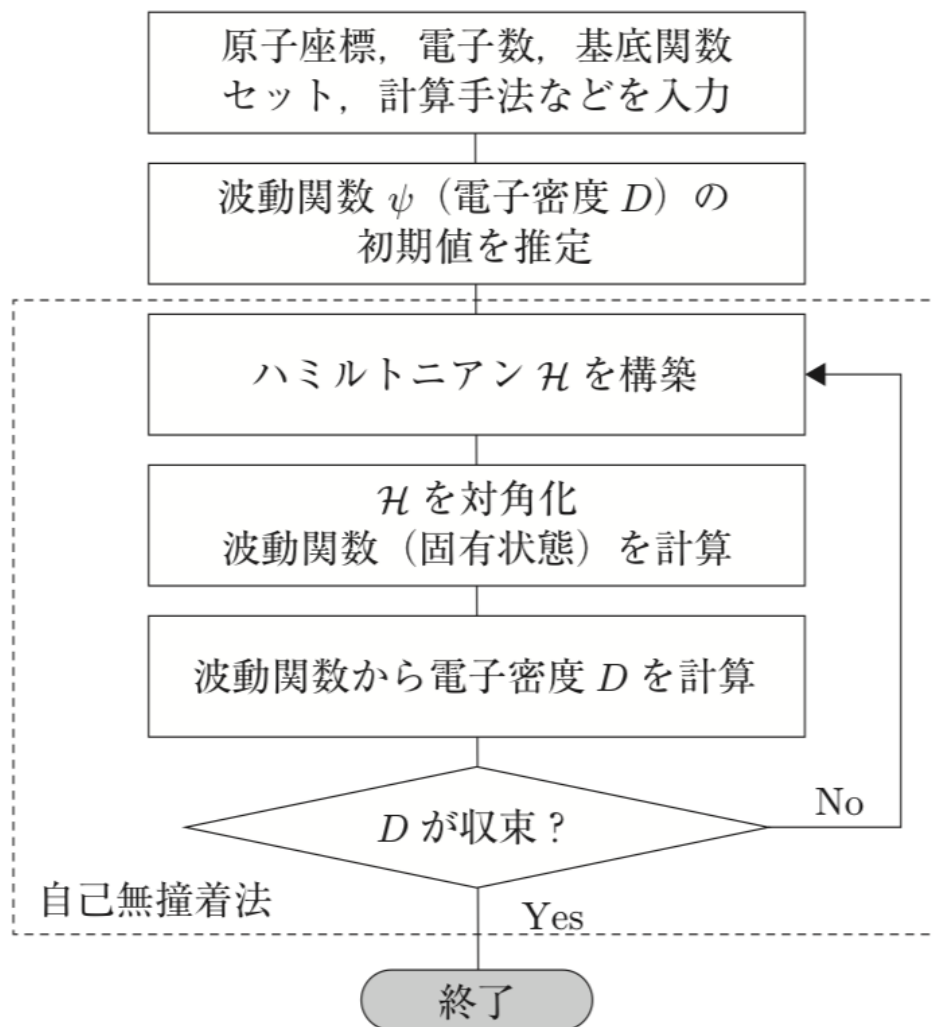


図 4.5 量子化学計算の手順

多体問題をそのまま解くのは大変なので、多体の波動関数を

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2) \cdots \phi_N(\mathbf{r}_N)$$

のように変数分離して N 体問題を N 個の 1 体問題に近似して解く。多体問題は、ある 1 つの電子 i が受けるクーロン相互作用 $\frac{1}{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}$ が周囲の $(N - 1)$ 個の電子の位置 $\mathbf{r}_j (i \neq j)$ から計算する必要があることに由来する。また、この変数分離と同時に、電子間の相互作用を注目する電子の位置 \mathbf{r}_i のみの関数で近似(平均場近似)すると大胆に簡単化できる。これらの手続きによって N 体の多体問題を N 個の 1 体問題として処理する。ただし、多体の効果は後で取り組むことにする。

実は

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \phi_1(\mathbf{r}_1)\phi_2(\mathbf{r}_2) \cdots \phi_N(\mathbf{r}_N)$$

は電子系の波動関数が満たすべき性質(反対称性?)を満たしていないので、そのままでは使えない。Hartree-Fock 法と呼ばれる最も基本的な量子化学計算手法では、解となる電子系の波動関数は $\tau_i = \mathbf{r}_i \sigma_i$ (i はスピン座標)として

$$\psi(\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(\tau_1) & \phi_1(\tau_2) & \dots & \phi_1(\tau_N) \\ \phi_2(\tau_1) & \phi_2(\tau_2) & \dots & \phi_2(\tau_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_N(\tau_1) & \phi_N(\tau_2) & \dots & \phi_N(\tau_N) \end{vmatrix}$$

のようなスレーター行列式で書けると仮定する．この $\phi_i(\tau_j)$ はスピン軌道と呼ばれ j でラベルされている電子がラベル i という量子状態にあることを表している(スレーター行列式とスピン軌道の説明)．ここで、ラベル i を指定すると、電子の空間分布(軌道自由度)とスピンという量子力学的な自由度の両方が同時に指定されているとする．

以上のスレーター行列式で書くという近似をしたとしても、解くべきシュレディンガー方程式は偏微分方程式のまま(Hartree-Fock 方程式)で、計算機で解くにはまだ難しい．そのため、通常は $\phi_i(\tau)$ をさらに別の関数セット $\{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_M\}$ の線型結合で

$$\phi_i(\tau) = \sum_{j=1}^M c_{ji} \varphi_j(\tau)$$

ように展開し、展開係数 c_{ji} の最適化問題として処理する．関数 $\varphi_i(\tau)$ の関数形は、物理的に妥当で計算機でも扱いやすい形を使用する．例えば、量子化学ではガウス関数($a \exp(-\frac{(x-b)^2}{2c^2})$), 固体物理学では平面波($\exp(ik \cdot x)$) を使用することが多い．このような関数を基底関数と呼ぶ．

基底関数で展開すると、 N 本の非線型・偏微分・連立方程式を

$$F(C)C = SCE$$

という Hartree-Fock-Roothaan (HFR) 方程式(非線型の固有値問題)に帰着でき、数値的に解くことができるようになる．ここで、 F はフォック行列、 C は基底関数の展開係数、 S は基底関数の重なり積分、 E はエネルギー固有値が対角成分に並ぶ $E_{lj} = \delta_{lj} E_j$ という行列です．それぞれ

$$\begin{bmatrix} F(C) \\ M \times M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ M \times N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S \\ M \times M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ M \times N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E \\ N \times N \end{bmatrix}$$

のような行列である．行列 $F(C)$ と S はそれぞれ

$$\begin{aligned} F_{nm}(C) &= H_{nm} + \sum_{j=1}^M \sum_{k=1}^M (CC^\dagger)_{kj} (U_{njkm} - U_{njmk}) \\ H_{nm} &= \int \varphi_n^*(\tau) \left(-\frac{1}{2} \nabla^2 - \sum_k \frac{Z_k}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_k|} \right) \varphi_m(\tau) d\tau \\ U_{njmk} &= \int \varphi_n^*(\tau) \varphi_j^*(\tau') \left(\frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right) \varphi_m(\tau) \varphi_k(\tau') d\tau d\tau' \\ S_{nm} &= \int \varphi_n^*(\tau) \varphi_m(\tau) d\tau \end{aligned}$$

である．式中の H_{nm} , U_{njkm} , S_{nm} は基底関数のセットと原子核に関するパラメータ Z_k , \mathbf{R}_k が決まれば数値積分や積分公式を使うなどして値を求めることができる．また、フォック行列 $F(C)$ は C から計算される行列なので、この固有値方程式はもとの Hartree-Fock 方程式と同様に非線型のままであるから、これは自己無撞着法によって解く．

Hartree-Fock 法の計算量は用いる基底関数の数 M (=フォック行列 $F(C)$ の次元)に対して $O(M^4)$ である．主に、 C が与えられたときに 2 電子積分 U_{njmk} を計算してフォック行列 $F(C)$ を求める部分の計算量が $O(M^4)$ であることに依る．その後の $F(C)$ の対角化の計算量は $O(M^3)$ である．