

2024 年度年次報告書

量子・古典の異分野融合による共創型フロンティアの開拓

2024 年度採択研究代表者

上田 宏

大阪大学 量子情報・量子生命研究センター
准教授

テンソルネットワークの媒介する量子・古典融合

主たる共同研究者：

奥西 巧一（新潟大学 自然科学系 准教授）

諏訪 秀麿（東京大学 大学院理学系研究科 助教）

研究成果の概要

上田グループでは、従来型のテンソルネットワーク(TN)では計算コストの観点からあまり検証されてこなかった、少数の量子ゲートで表現されるエンタングルメント体積則を満たす量子状態を対象に、その表現能力を 1 次元縦および横磁場イジングスピン鎖の実時間ダイナミクス計算において調査した。調査の結果、虹状態と呼ばれる量子状態を構成するのに最小な“ひし形構造”を持つ量子回路が、縦磁場が摂動的に存在するパラメータ領域において、既存の行列積状態にインスパイアされた同じ自由度を内包する量子回路と比較して、高精度なシミュレーション結果を与えることが示された¹⁾。

諏訪グループでは、TN とマルコフ連鎖モンテカルロ法を融合し、負符号問題を克服する効率的なサンプリング手法を開発した。本手法を 2 次元イジング模型に適用し、TN 縮約の近似精度を決定するボンド次元の増加によって、統計誤差の大幅な低減と符号問題の改善を実証した²⁾。また、自己相関による計算効率低下を克服するため、詳細つりあい条件を破る不可逆な遷移を用いた有向ワームアルゴリズムを開発した。実際に本手法を 3 次元イジング模型に適用し、従来法に比べて相関時間を大幅に短縮することに成功した³⁾。

奥西グループでは、上田グループらと協力して、Tree 型 TN の構造最適化アルゴリズムの性能評価を行った。具体的には、全結合型ランダムボンドハイゼンベルク模型および非一様な縦磁場中の全結合型 XY 模型(超伝導のリチャードソン模型と等価)に対して、計算精度の様々な最適化プロセスの組み合わせ依存性を調査した。その結果、ランダムボンドハイゼンベルク模型では構造最適化により変分エネルギーが低下する一方で、全結合型 XY 模型では可積分性に由来する縮退構造に起因し、フラグメントなネットワーク構造が現れやすいことが明らかとなった⁴⁾。

【代表的な原著論文情報】

- 1) S. Miyakoshi, T. Sugimoto, T. Shirakawa, S. Yunoki, H. Ueda, “Diamond-shaped quantum circuit for real-time quantum dynamics in one dimension”, *Phys. Rev. Res.* **6**, 043318 (2024).
- 2) H. Suwa, S. Todo, “Control of probability flow in Markov chain Monte Carlo—Nonreversibility and lifting”, *J. Chem. Phys.* **161**, 174107 (2024).
- 3) S. Todo, “Markov Chain Monte Carlo in Tensor Network Representation”, arXiv:2412.02974 (2024).
- 4) T. Hikihara, H. Ueda, K. Okunishi, K. Harada, T. Nishino, “Improving accuracy of tree-tensor network approach by optimization of network structure”, arXiv:2501.15514 (2025).