

研究終了報告書

「スパースモデリングを用いた固体の革新的量子計算技術の開発」

研究期間:2020年11月～2024年3月

研究者:品岡 寛

1. 研究のねらい

量子力学的な効果を用いて超並列・大規模情報処理を行う量子情報処理技術において、近年、ハードウェア開発が急速に進み、その能力を活用する量子ソフトウェア・アルゴリズム開発の重要性が高まっている。特に、高効率な新奇材料・機能探索や材料解析への応用が期待できる量子多体系のシミュレーションが注目されている。量子化学では実証研究が始まり、近い将来 100+量子ビット級の NISQ (Noisy intermediate-scale quantum computer)による量子超越が期待されている。

化学系と比べてとき、固体の基礎科学・材料としての魅力は、巨視的な数の電子の協調から生じる多彩な量子現象にある。特に、電子相関の強い「強相関化合物」は、高温超伝導などの非自明な物性を生かした材料応用が期待されている。微視的機構の定性的理解は古典コンピュータを用いて着実に進んでいるが、理論主導の新機能探索及び材料解析に必要な計算精度を達成できていない。その問題の本質は量子かさね合わせ効果による計算量の指数関数的爆発にあり、古典コンピュータ単独では精度を大幅に改善する余地がない。一方、量子コンピュータも固体の巨視的な全自由度をまともには扱えないため、古典と量子を賢く組み合わせ、制限されたリソースを活用する革新的なアルゴリズムの開発が不可欠である。

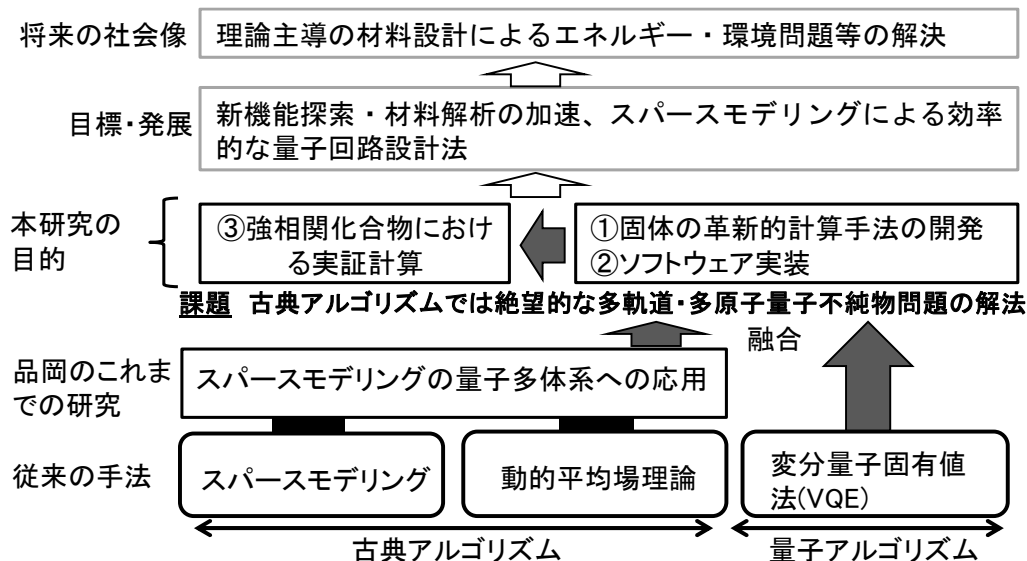


図 1 本研究の全体像

本研究では、量子超越性を生かした固体の高精度量子多体計算手法を開発し、古典アルゴリズムでは不可能な強相関化合物である高温超伝導体材料などの定量的物性予測を実現することを狙う。具体的には、①量子多体計算理論「動的平均場理論」、データ科学的手法「スパースモデリング」と量子回路を組み合わせた量子-古典ハイブリッドアルゴリズム、②固体の物性予測を行う量子ソフトウェア、を開発する。古典的な情報圧縮技術と量子アルゴリズムを融合し、制限されたリソースを巧みに利用することを狙う。

2. 研究成果

(1) 概要

当初計画に従って、以下の(A), (B)の研究を遂行する中で、グリーン関数の計算コストが極めて高く、近未来に実現される量子ハードウェアでは現実的な系の計算が難しいことが明らかになった。そのため、(B)において、変分パラメータの削減などのアルゴリズム改良を進める一方、固体の計算の革新に向け新機軸を模索した。その結果、当初想定外の (C), (D)の成果を得た。(C)は量子フーリエ変換に着想を得た **Quantics tensor train** に基づく、場の量子論計算の新しい準量子技術である。本領域内での分野横断型共同研究、国際的な共同研究に発展した。一方、(D)では、量子計算の結果を基にした機械学習モデルの構築に向け、基礎理論開発を行った。長期課題である固体の量子計算技術開発に向け、人材育成、本領域メンバーを中心とする分野横断型コミュニティ [学術変革領域研究(B)「量子古典混合」]を形成した。

(A) スパースモデリング技術の開発とソフトウェア整備

- 量子不純物問題の離散化に対するスパースモデリング技術の開発 (**PRB×1**)
- スパースモデリング Python/Julia ライブラリの国際共同開発 (ウィーン工科大学等) とチュートリアル整備 [研究補助者: 櫻井理人、柿澤文哉] (**Software X×1**)

(B) 変分量子アルゴリズムに基づく量子不純物ソルバーの開発 [研究補助者: 櫻井理人、領域内共同研究: 水上渉]

- 虚時間グリーン関数計算の変分量子アルゴリズムの開発 (**PRR×1**)
- 量子不純物問題に特化した軽量な変分量子回路の開発 (**PRR×1**)

(C) 準量子技術 **Quantics tensor train (QTT)**の開発

- 場の量子論計算の情報圧縮演算技術の開発 (**PRX×1**) [研究補助者: 櫻井理人]
- **Quantics** 表現の高速学習技術(**Quantics tensor cross interpolation**)の開発 [CEA グルノーブル等との国際共同研究] (**PRL×1**)

(D) 人材育成・分野横断型コミュニティの形成

- 学術変革領域研究(B)「量子古典融合」採択 (2023～2025 年度) [領域内からの参画: 大久保毅、水上渉、御手洗光祐、杉崎研司]
- 計算物理春の学校 2023 の発起 [領域内からの参画: 大久保毅、水上渉]

(2) 詳細

(A) スパースモデリング技術の開発とソフトウェア整備

(A-1) 量子不純物問題の離散化に対するスパースモデリング技術の開発 (**PRB×1**)

2020 年度は、スパースモデリングに基づく電子浴のコンパクトな離散化法を開発し、現実物質における必要バスサイト数の見積もりを行った。動的平均場理論 (DMFT)による固体の計算において、注目する活性空間の外の情報は、電子浴として取り込まれる。量子計算を用いて量子不純物問題を解くには、アクション形式で書かれる電子浴を一旦、有限個のバスサイトをを用いて離散化する必要がある。これは電子浴を記述する混成関数をフィッティングすることで通常行われるが、そのフィッティングは非凸かつ悪条件であり、多くの縮退した解が存在する。グループ **LASSO** と呼ばれるスパースモデリング技術を使うことで、縮退した解の中から、バスサイト数が少ない解を自動的に選び出す技術を開発した。この手法を 1. 乱数で生成した人工的な混成関数、2. 典型的な鉄系高温超伝導体 **LaAsFeO** の 20 軌道不純物問

題、の2つに適用し、フィッティング精度と必要なバスサイトの数の関係を調べた。結果として、必要なバスサイト数は不純物内の自由度に比例する一方、逆温度およびフィッティング精度には対数的にしか依存しないことが明らかになった。

(A-2) スパースモデリング Python/Julia ライブラリの国際共同開発とチュートリアルを整備 (Software X×1)

(A-1)では、グリーン関数のスパースモデリング (虚時間メッシュの生成、虚周波数へのフーリエ変換)には、品岡等が開発した Python ライブラリ `irbasis` を用いていた。2021 年度後半から、ウィーン工科大学の Dr. Markus Wallerberger 及び共同研究者とアップデート版 `sparse-ir` (<https://github.com/SpM-lab/sparse-ir>)の開発を行った。新しい `sparse-ir` ライブラリは、Python に加えて Julia (<https://github.com/SpM-lab/SparseIR.jl>), Fortran(<https://github.com/SpM-lab/sparse-ir-fortran>)から利用可能になる。また、日欧米の共同研究者によるサンプルコード集を整備した。Google Scholar にて、2023 年出版以降 11 回引用されるなど、順調に普及している。

(B) 変分量子アルゴリズムに基づく量子不純物ソルバーの開発

(B-1) 虚時間グリーン関数計算の変分量子アルゴリズムの開発 (PRR×1, 代表論文 1)

本研究では、時間発展のための量子古典ハイブリッドアルゴリズム Variational Quantum Simulation (VQS)を応用することで、虚時間グリーン関数を計算する計算手法を提案した。従来の VQS では、規格化された波動関数の虚時間発展を計算することが可能であった。新規手法では、1. 波動関数のノルムの虚時間依存性を簡便に計算し、2. グリーン関数の計算に必要な 1 粒子励起状態を計算する、ことが可能になった。また、虚時間発展計算には、グリーン関数のスパースモデリング法から得られる、非均一な虚時間メッシュを用いることで計算時間の短縮が可能である。

(B-2) 量子不純物問題に特化した軽量な変分量子回路の開発 (PRR×1)

(B-1)では、物理的直感に基づく Unitary coupled cluster Ansatz with generalized singles and doubles (UCCGSD)という変分量子回路を用いていた。しかし変分パラメータが系の軌道自由度 N に対して $O(N^4)$ で急速にスケールするため、現実的な多軌道模型への適用は困難である。そこで、領域メンバーの倉重等によって開発された `k-uCJ` 法を量子不純物問題に適用し、パラメータ数を $O(N^2)$ まで減らした。また、異なるバスサイト間に直接のホッピングがないことに着目し、さらに係数を削減した。これらの提案手法を典型的な量子不純物問題の基底エネルギーに対する精度を確認した。また、英国の G. Booth グループと共同研究を行い、スペクトル関数のモーメントを計算することで、静的な観測量からグリーン関数をノイズに対して安定して計算できることを確認した。

(C) 準量子技術 Quantics tensor train (QTT)の開発

古典コンピュータを物理に活用する手法として、`quanticcs tensor cross interpolation` 法を開発した。さがけ研究と並行し、品岡は、場の量子論の圧縮技術に関する科研費・基盤研究 B 「次元圧縮技術が拓く二粒子応答の第一原理計算」を遂行していた。その際に、異なる長さスケールが混在するデータの圧縮技術の開発を試み、試行錯誤していた。2022 年夏、量子フーリエ変換などの類推から、準量子技術 Quantics tensor train がその圧縮に使えることを発想し、2022 年秋には成果をプレプリントサーバにアップロードした。場の量子論計算の専門家

はその重要性にすぐに気づき、国際的な共同研究が広がった。

(C-1) 場の量子論計算の情報圧縮演算技術の開発 (PRX×1, 代表論文 2) [研究補助者: 櫻井理人]

スイス、オーストリア等の共同研究である。量子埋め込み理論を含む場の量子論計算では、量子系の応答関数の時空依存性の情報圧縮が長年の課題である。本研究では、指数的に異なる時空依存性を記述する自由度"quantics"の導入、時空依存性データのテンソル分解を組み合わせることで、相関関数の大幅データ圧縮を可能にした。また、量子フーリエ変換などを用いた、圧縮した形式での場の量子論計算を数値的に実証した。これらの準量子技術は、古典コンピュータの性能を有効活用する方法であり、広く普及が期待される。

(C-2) Quantics 表現の高速学習技術(Quantics tensor cross interpolation)の開発 [CEA グルノーブル等との国際共同研究] (PRL×1, 代表論文 3)

(C-1)の成果を arXiv に投稿後、スイス、ドイツに渡航し、招待講演、セミナーを行った。それを切っ掛けに始まったフランス、ドイツ、オーストリアとの共同研究である。限られた観測データから、高速に quantics 表現を学習する、quantics tensor cross interpolation を開発した。特異値分解よりも軽量の低ランク近似 (cross interpolation)に基づき、高次元テンソルの場合には特異値分解に基づく従来法よりも指数的に速い。応用例として、1 粒子グリーン関数の波数依存性の積分、ベリーフラックスの波数積分によるチャーン数の計算例を示した。いずれに場合にも、計算量に対して、空間解像度を指数的に高められことで、量子相転移点を精度良く見積もれることを実証した。

(D) 人材育成・分野横断型コミュニティの形成

量子と古典アルゴリズムの両方に通じた若手研究者の育成や、コミュニティ形成を行った。

- 学術変革領域研究 B「量子古典融合アルゴリズムが拓く計算物質科学」採択 (領域代表: 品岡、2023～2025 年度) [領域内からの参画: 大久保毅、水上渉、御手洗光祐、杉崎研司] <https://qc-hybrid.github.io>
- 計算物理春の学校 2023 の発起 [領域内からの参画: 大久保毅、水上渉] https://hohno0223.github.io/comp_phys_spring_school2023
学術変革 A「学習物理」メンバーと協力し、機械学習、物性理論、量子計算までカバーする春の学校を創設した。2024 年 3 月に第 2 回を開催予定である (品岡は advisory board としての参画)。

3. 今後の展開

今後、準量子技術 Quantics 表現は、場の量子論計算だけではなく、化学反応など、桁違いに広い長さスケールが共存する系の数値計算への展開が期待される。また、CEA グルノーブル、ミュンヘン大学の共同研究者と共同で、欧州研究評議会(ERC)の研究助成金に応募するなど国際的な期待は高まっている。また、国内では、学術変革領域研究 B「量子古典融合」(～2025 年度)、JST 創発的研究支援事業「2 粒子レベルの量子埋め込み理論に基づく新規第一原理計算手法の開発と実証」(フェーズ 1: ～2026 年度)を通じて、準量子技術の開発・普及活動を継続予定である。

4. 自己評価

実機を用いた固体の量子計算技術の検証という当初目的は達成できなかった。しかし、科研費・基盤 B プロジェクトの協奏を通じた準量子技術の開発、英国・オーストリア・ドイツ・フランスなどの共同研究の拡がり、領域内メンバーと協力した人材育成事業への展開など、「当初想定しなかった」領域内の交流を通じた飛躍を達成できた。その点で、期待以上の成果を上げたと考えている。

5. 主な研究成果リスト

(1) 代表的な論文(原著論文)発表

研究期間累積件数:8件

1. R. Sakurai, W. Mizukami, H. Shinaoka. *Hybrid quantum-classical algorithm for computing imaginary-time correlation functions*. Physical Review Research **4**, 023219 (2022).

強相関物質の記述は物理学の難問であり、量子埋め込みはその有望なアプローチである。特に、動的平均場理論(DMFT)は元の系を相関軌道が電子バスに埋め込まれた量子不純物モデルにマッピングする。この計算の最大の課題はグリーン関数の計算であり、虚時間グリーン関数の効率的な手法はまだ確立されていない。本研究では、限られたハードウェアリソースを持つ量子デバイス上で虚時間グリーン関数を計算するための量子古典ハイブリッドアルゴリズムを提案し、量子回路シミュレータを用いて典型的な不純物モデルのグリーン関数の計算を行い、アルゴリズムを検証した。

2. H. Shinaoka, M. Wallerberger, Y. Murakami, K. Nogaki, R. Sakurai, P. Werner, and A. Kauch. *Multiscale Space-Time Ansatz for Correlation Functions of Quantum Systems Based on Quantics Tensor Trains*. Physical Review X **13**, 021015 (2023).

量子系の相関関数は場の量子論の構成要素であり、高次元の時空領域で定義されている。精密な多体理論の適用には、効率的な数値手法の開発が必要である。本研究では、quantics/quantized tensor train (QTT)に基づく、量子系の相関関数の圧縮・演算法を提案した。指数関数的に異なる長さスケールを記述する「qubit」を用いて時空を離散化し、結果として得られる高次元テンソルを tensor train (または行列積状態)に分解する。異なる長さスケール間の相関弱い場合、qubit の数 (~データ容量、計算量)に対して、長さスケールの幅を指数的に増やせる。論文では、様々な平衡・非平衡系に対する圧縮や演算性能を数値的に実証した。

3. M. K. Ritter, Y. Núñez Fernández, M. Wallerberger, J. von Delft, H. Shinaoka and X. Waintal. *Quantics Tensor Cross Interpolation for High-Resolution, Parsimonious Representations of Multivariate Functions in Physics and Beyond*. Phys. Rev. Lett. **132**, 056501 (2024).

連続変数の多変量関数は科学の様々な分野で登場する。そのような関数に対する数値計算は通常、記述の精度とメモリ容量の節約という、相反する要求の間で妥協を必要とする。最近、両方の要求を満たすための2つの有望な戦略が登場した:(i)関数を tensor train として表現する quantics 表現 (上述)、(ii) 多次元テンソルの低ランク構造を仮定し、少ないサンプルから tensor train による補完を提供する tensor cross interpolation (TCI) である。本研究では、これら2つの方式の利点を組み合わせた戦略である Quantics TCI (QTCI)を提案する。その可能性を凝縮系物理学からの応用例、波数積分の計算を用いて示した。この例では、少数の波数点での計算結果から、全波数空間での関数の補完を精度良く構成し、測定点数に対して指数的に補完誤差、最小長さスケールを向上できる。

(2) 特許出願

研究期間全出願件数:0 件(特許公開前のもを含む)

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

1. プレスリリース「量子力学世界を「スケール分離」する～計算機シミュレーションの大幅な効率化に期待～」<https://www.jst.go.jp/pr/announce/20230427-2/index.html>