

量子多体計算から眺める量子コンピュータとAI

上田宏

大阪大学 量子情報・量子生命研究センター





Center for Quantum Information and Quantum Biology

QIQB の研究領域 (研究者数 70名以上)

- 量子コンピューティング
- 量子センシング
- 量子情報デバイス
- 量子通信 / セキュリティ
- 学際的量子科学
- 量子生命

QIQB's Senior Leadership Team



北川 勝浩 特任教授
センター長



藤井 啓祐 教授
副センター長

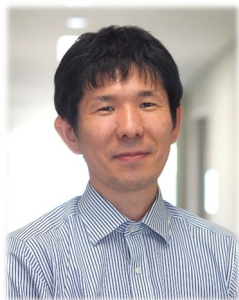


山本 俊 教授
副センター長



根来 誠 教授
副センター長

自己紹介

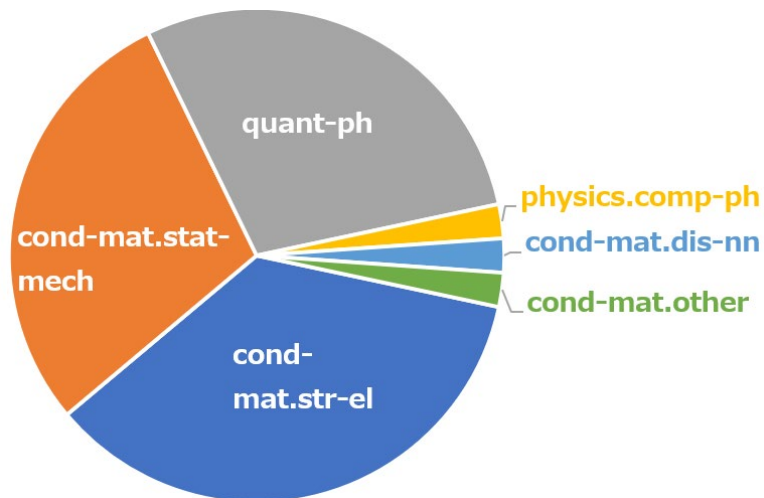


上田 宏

大阪大学 QIQB
准教授



研究分野 :



専門 : 計算物理 (量子・古典スピン系)、手法開発
キーワード : テンソルネットワーク(TN)、量子シミュレータ などなど

主に参画している国プロ

科学技術振興機構 (JST) CREST [量子フロンティア領域]

代表 FY2024-2029 : テンソルネットワークの媒介する量子・古典融合



Co-PI:



NEDO ポスト 5 G 情報通信システム基盤強化研究開発事業/
ポスト 5 G 情報通信システムの開発

FY2023-2027 : 計算可能領域の開拓のための
量子・スパコン連携プラットフォームの研究開発



Co-PI:

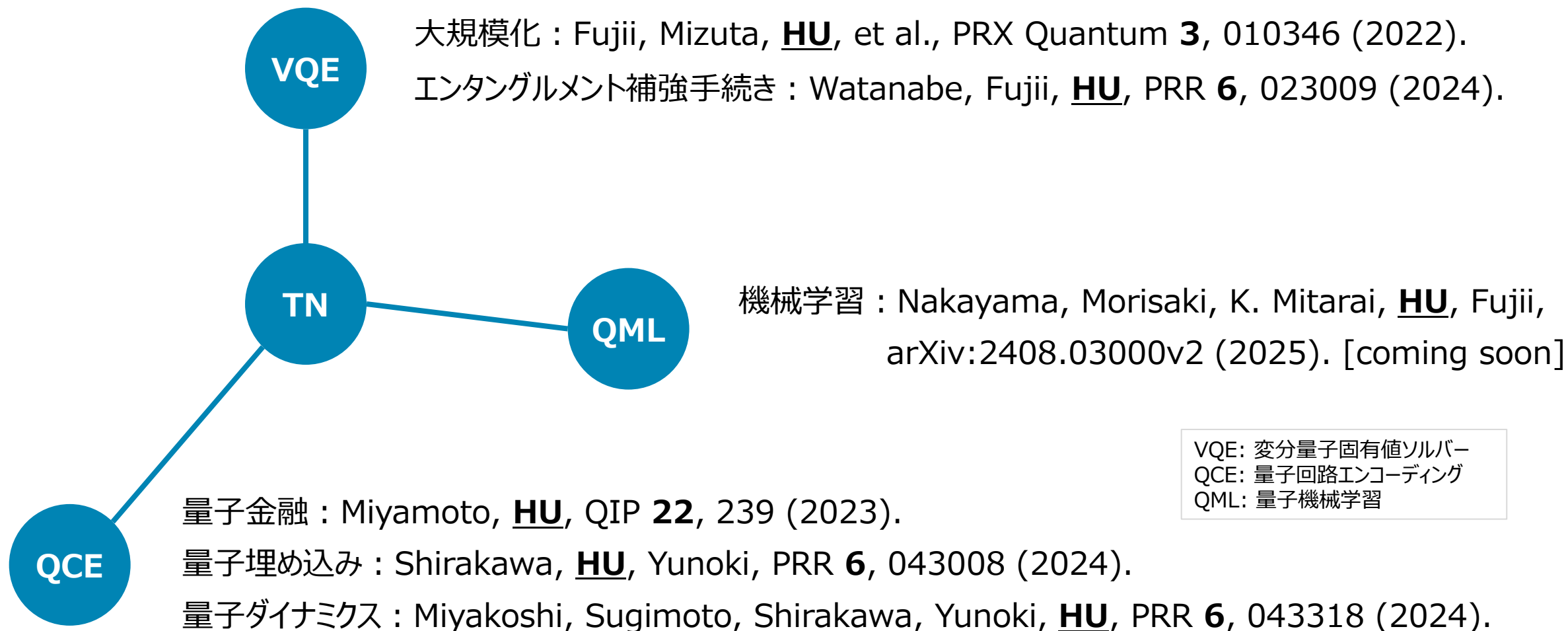


Collaborator:



最近携わった TN × 量子コンピューティング

4



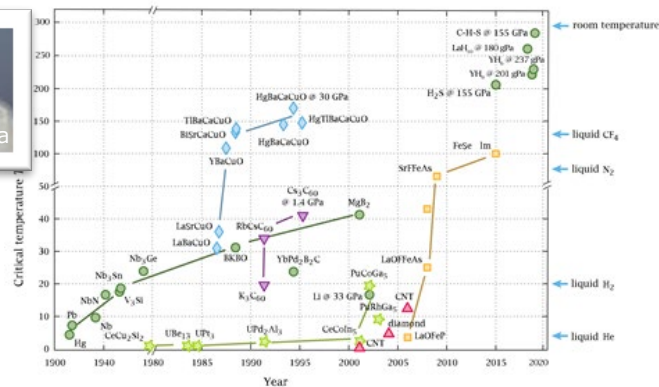
これらの話は今日は触れません

本講演 : 物性スケールでの多体問題解析ツールとしての機械学習と量子コンピュータの立ち位置を主に紹介

物性スケールでの量子多体物理

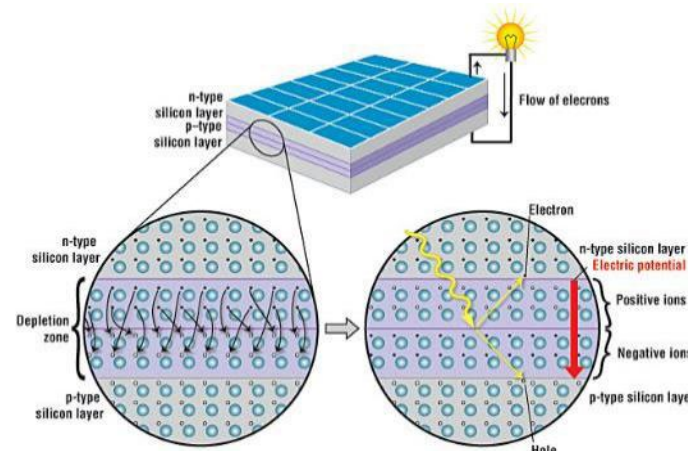
5

多様な応用事例



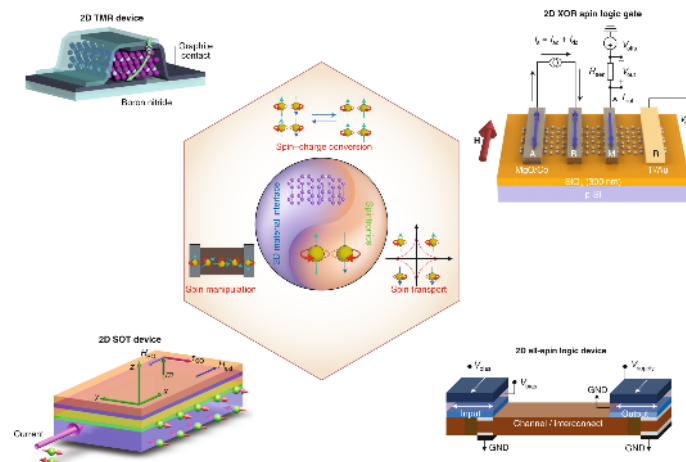
<https://www.chemistryworld.com/news/room-temperature-superconductivity-finally-claimed-by-mystery-material/4012591.article>

超伝導



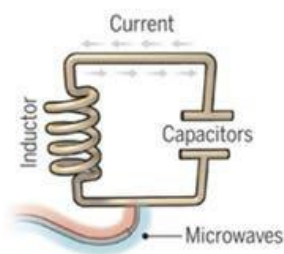
<https://www.acs.org/education/resources/highschool/chemmatters/past-issues/archive-2013-2014/how-a-solar-cell-works.html>

太陽電池

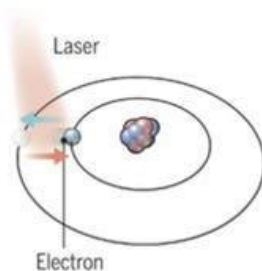


Nature Electronics 2, 274–283 (2019).

スピントロニクス



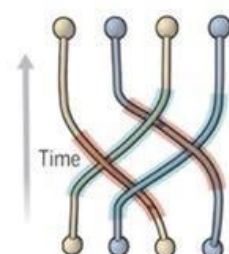
Superconducting loops



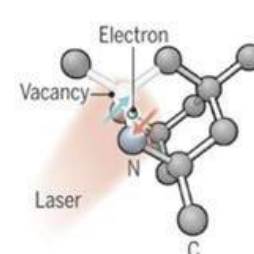
Trapped ions



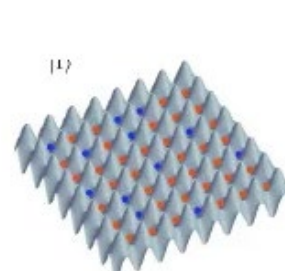
Silicon quantum dots



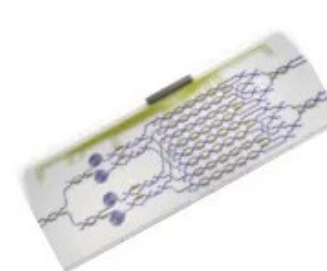
Topological qubits



Diamond vacancies



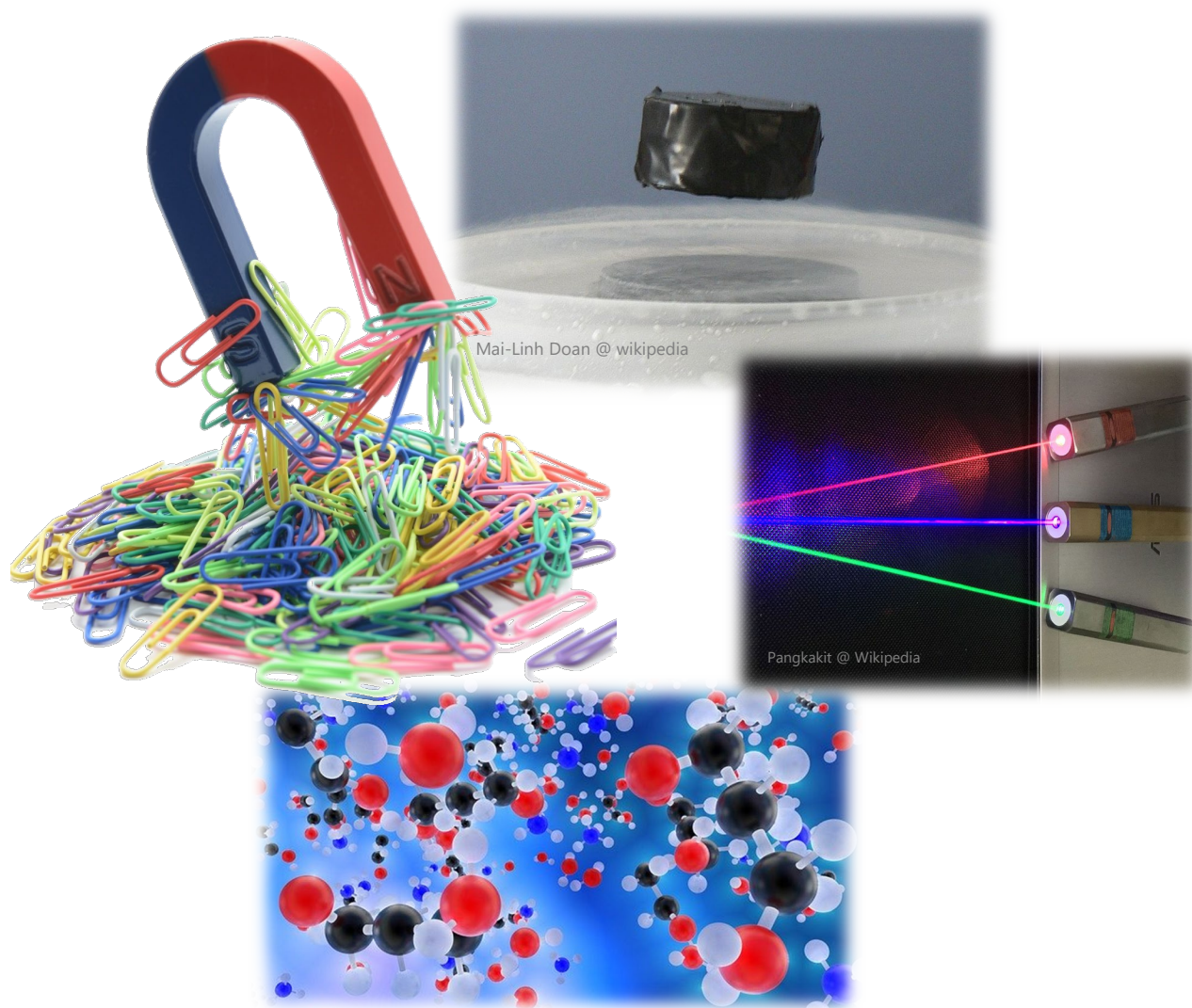
Neutral Atoms



Photonics

<https://medium.com/mmusings-on-deep-tech-the-economy-and-venture/its-time-to-clear-the-air-on-the-hype-around-quantum-838e4647f0ce>

量子コンピュータ



全部まとめて

大規模疎行列

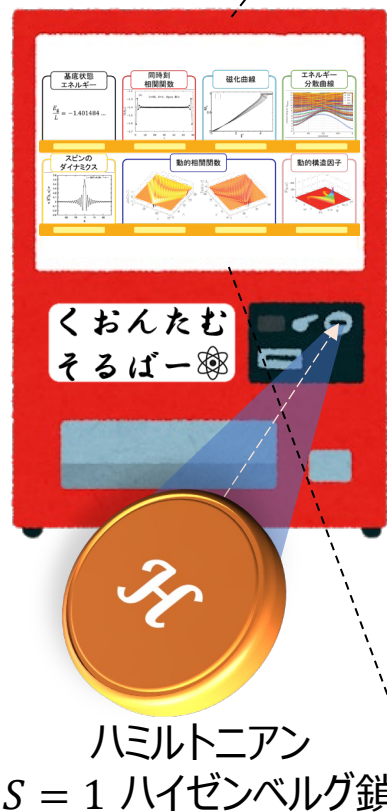
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H \psi$$

大規模（密）ベクトル

で理解 & 設計したい！

量子多体系シミュレータの1つの完成系

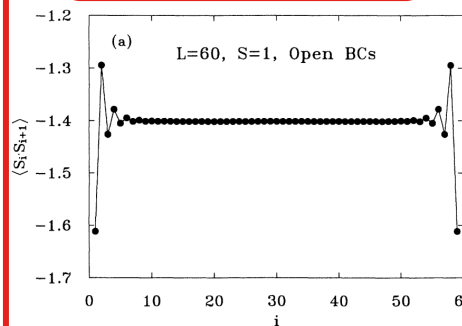
7



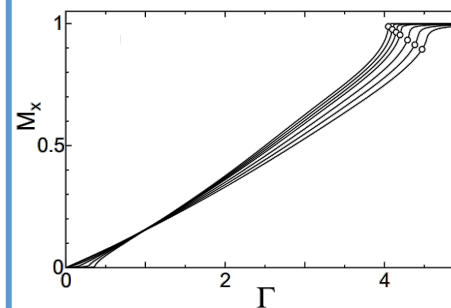
基底状態
エネルギー

$$\frac{E_g}{N} = -1.401484 \dots$$

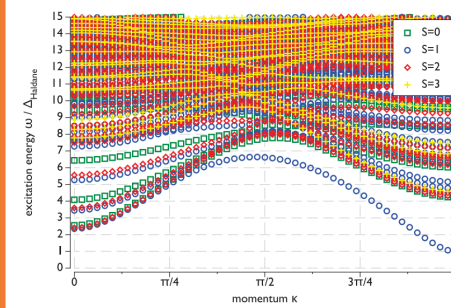
相関関数



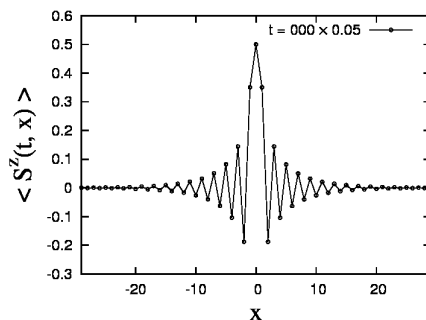
磁化過程



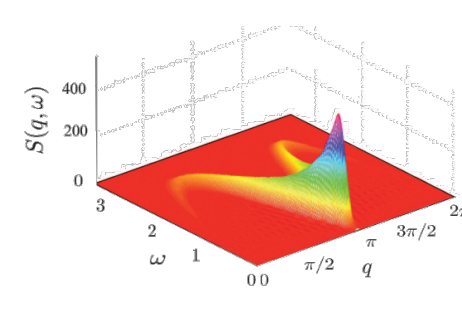
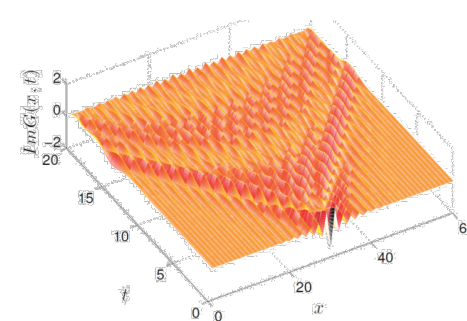
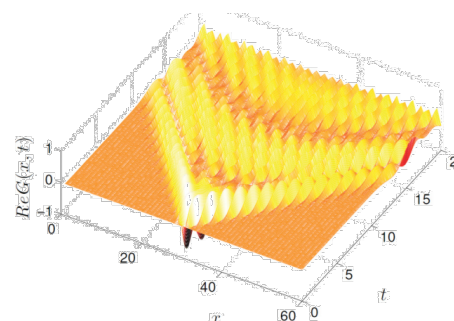
エネルギー分散



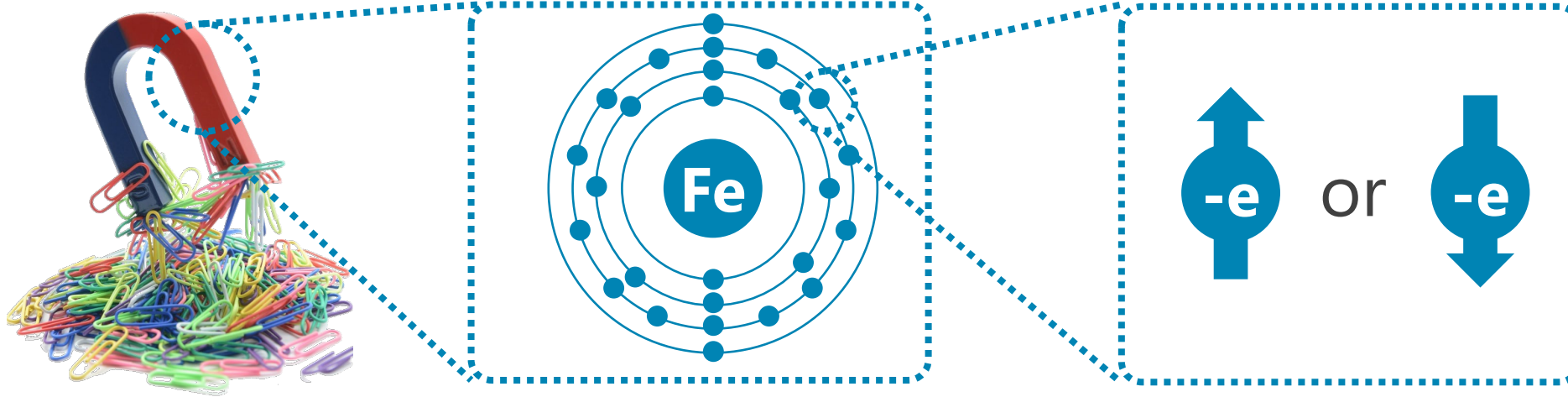
実時間発展



動的相関関数 (などなど)

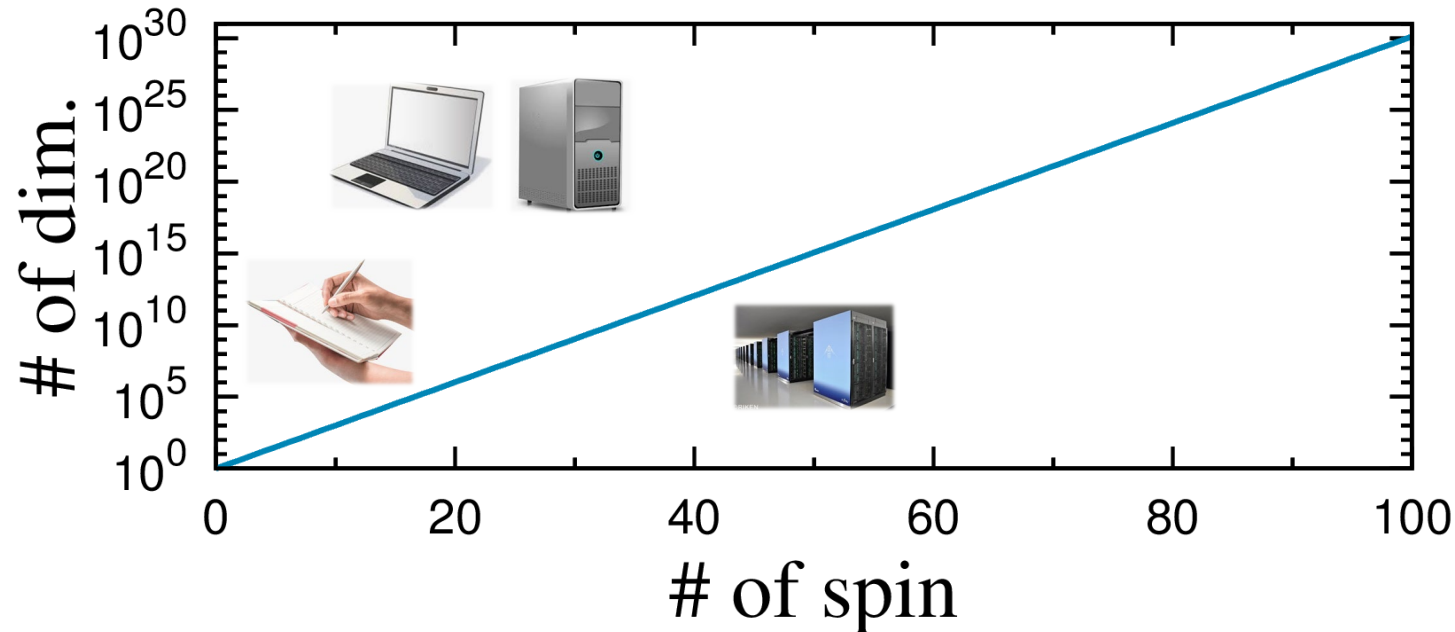


なぜ量子多体系が「最難関領域」の1つなのか？ 8



スピン1個の場合

2次元ベクトルで
状態が表現できる！



量子多体系×従来型計算機の場合

ベクトル次元：指数関数的発散

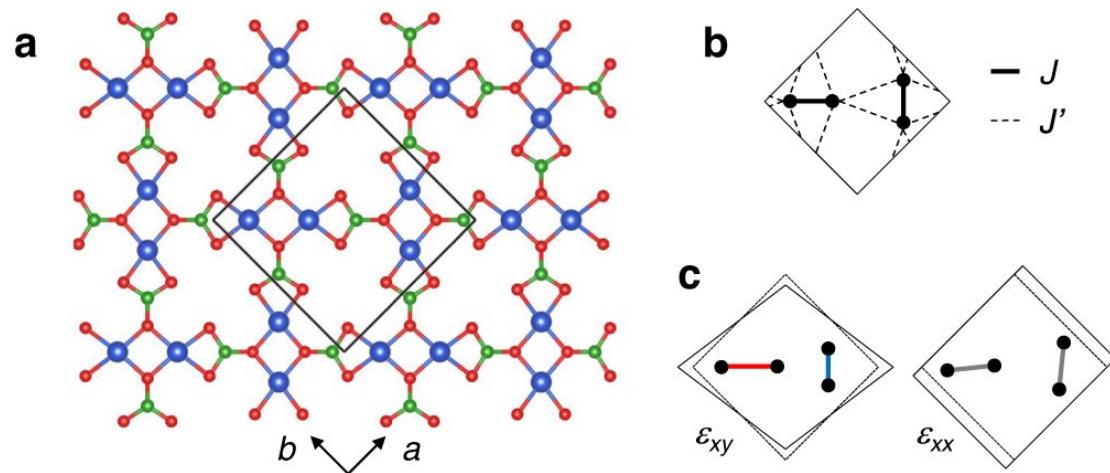
スピンを
1つ増やす \equiv

倍の計算資源

- 時間に依存しないシュレディンガー方程式： $\mathbf{H}\psi = E\psi$
→ 大規模疎行列固有値ソルバーが必要 ↑ (最低) 固有値
- 磁性体有効模型に現れる量子相転移点の推定 数値対角化法

H. Nakano, H. Tadano, N. Todoroki, and T. Sakai: J. Phys. Soc. of Jpn. **91**, 074701 (2023).

(MPI並列化された TITPACK を利用)



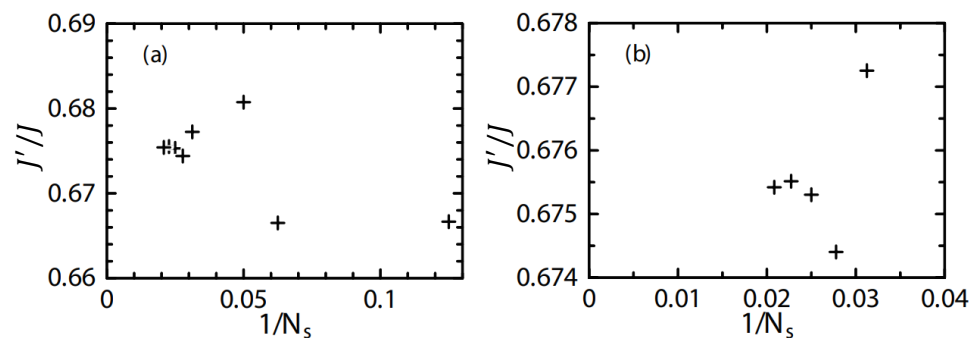
$\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ の結晶構造と有効模型

モデル：Spin-1/2 シャストリー・サザーランド模型

最大スピン数： $N_s = 48$

取り扱う最大の行列次元：32,247,603,683,100

最大規模計算: 65536 nodes @ 富岳 (41% 富岳全系)



- **よくある要望**：近似手法でもよいので扱えるスピン数を多くしたい
- 磁性体有効モデルの基底状態解析 **量子モンテカルロ法**

S. Todo, H. Matsuo, H. Shitara: Compt. Phys. Commun. **239**, 84 (2019).

Case1: Spin-1/2 ハイゼンベルグ鎖： $L = 2.6 \times 10^6$ スピン, 逆温度 = 2.6×10^6 , 利用ノード数：24576 @ K
並列化効率：46.9%

Cf) 数値対角化の場合：最大でも $L \sim 50$ (Wietec, Läuchli, 2018)

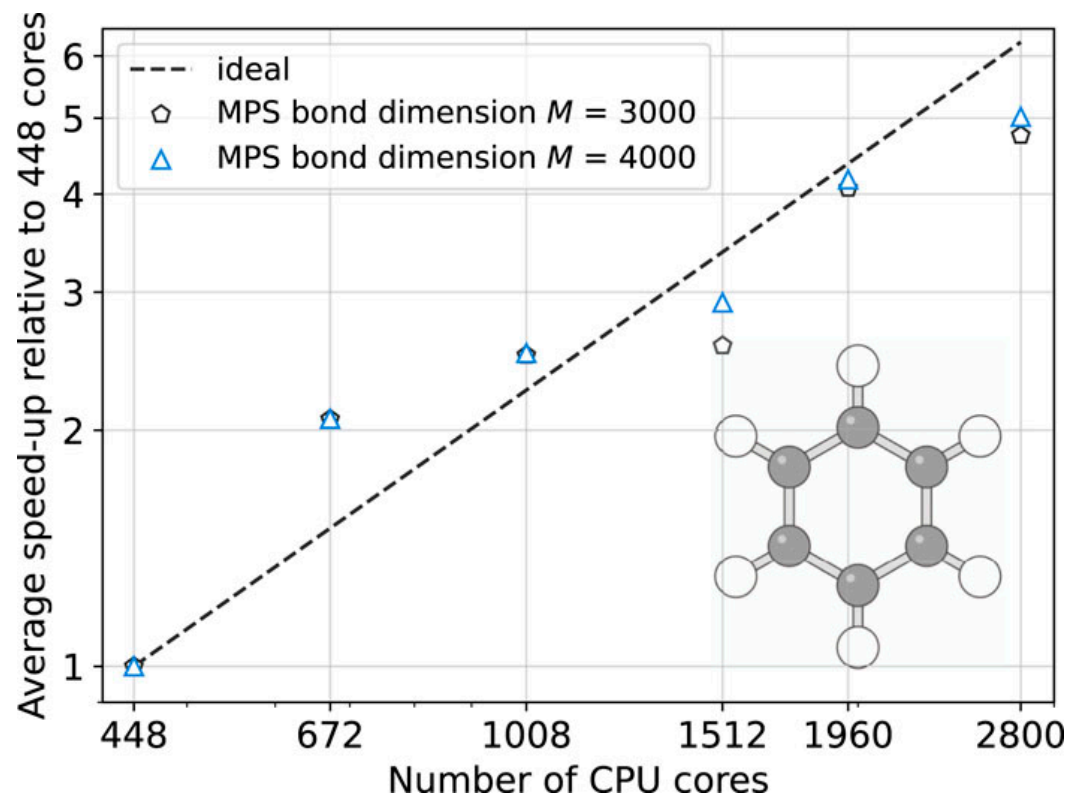
Case2: Spin-4 ハイゼンベルグ鎖： $L = 73728$ スピン, 逆温度 = 9216, 利用ノード数：2048 @ K

Cf) 数値対角化の場合： $L \sim 12$ (Nakano, et al., 2008)

S	E/L	反強磁性的感受率	相関長	Δ	Method
4	-17.480(7)	$3.49(4) \times 10^7$	$1.040(7) \times 10^4$	6.3×10^{-4}	ND (lower bound) [35]
				8.1×10^{-4}	ND (upper bound) [35]
				$7.99(5) \times 10^{-4}$	QMC (present work)

- よくある要望：符号問題が発生する問題でも大規模系にアクセスしたい
- 量子化学計算への応用 **テンソルネットワーク法 (TN法 ; 特にDMRG法)**

H. Zhai, et al., G. K.-L. Chan, J. Chem. Phys. **159**, 234801 (2023)



計算ライブラリ Block2 のベンチマーク

ターゲット：ベンゼン分子

実空間軌道数：108

電子数：30

計算基底：cc-pVDZ

Resnick HPC Center (Caltech) 保有のマシンにて実施

従来型計算機を利用した state-of-the-art な手法の1つ

下記のすべての条件を満たす現象

- 1) 相関長が長い系 or 非一様系 (数値対角化でアクセス困難)
- 2) 符号問題が現れる系 (量子モンテカルロでアクセス困難)
- 3) 高い量子的なエンタングルメントが現れる系 (TNでアクセス困難)

例えば...

- ・ 高次元フラストレート系に現れるスピン液体状態の励起状態や有限温度特性
- ・ 高次元量子系の実時間発展 (高次元系の非平衡物理全般)
- ・ 大規模な高次元強相関電子系 (量子化学計算もここに含まれる)

 **HPCの単純な延長線上にない新しい計算自由度への期待**

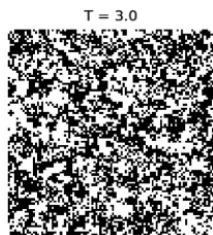
• 物質相の機械学習

J. Carrasquilla, R. G. Melko: Nat. Phys. **13**, 431 (2017). 被引用数: **1800超** by Google

学習用の模型：正方格子上的Ising模型

(代表的な古典統計模型の1つ)

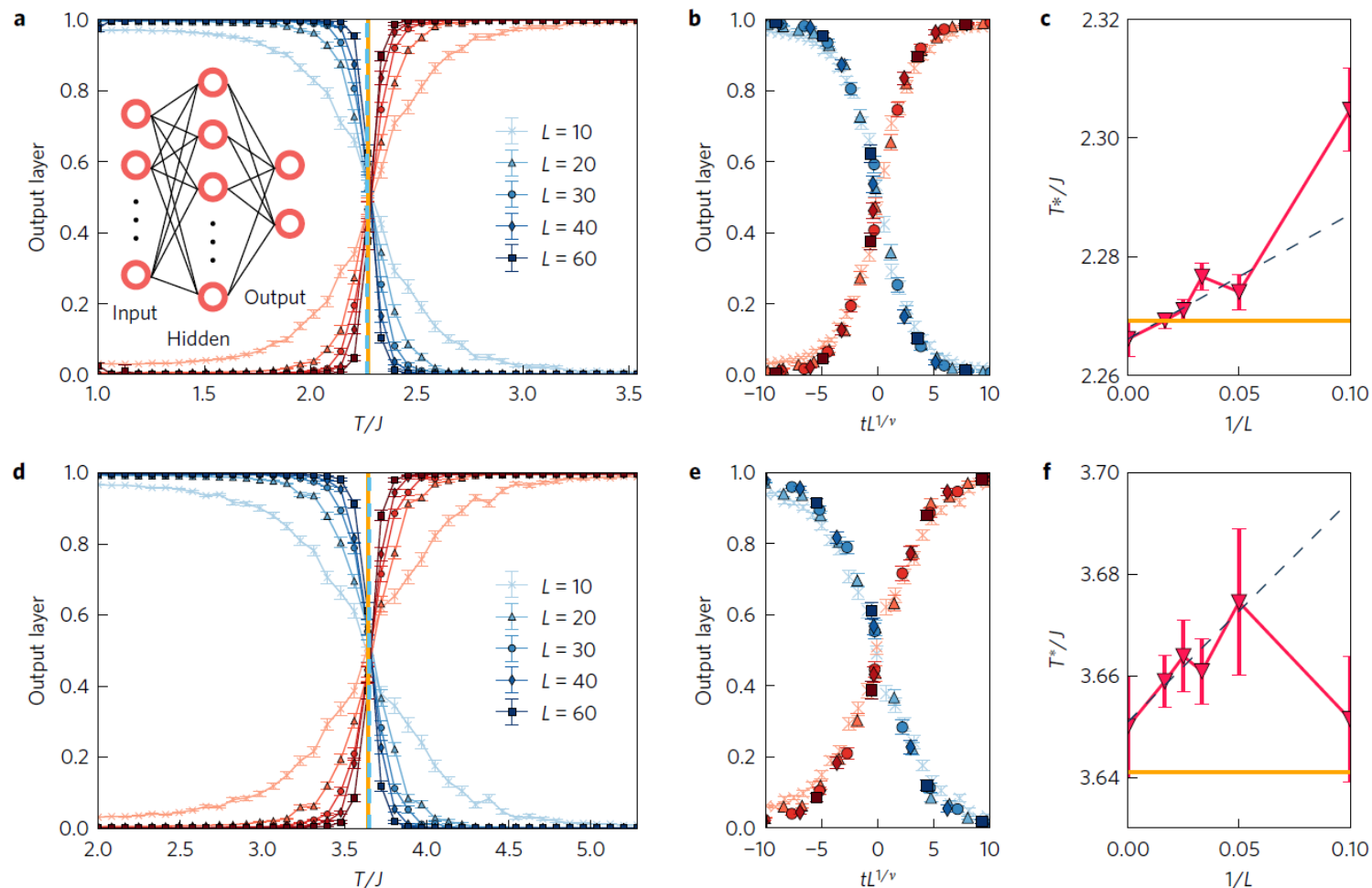
入力：秩序相と無秩序相
の情報&スナップショット



教師あり学習で物理量を勝手に推定
(秩序変数【磁化】を学習)

訓練していない模型の相転移の判定
にも成功 (普遍的な物理の学習)

局所的な秩序パラメータが存在しない
トポロジカル相の判定にも成功



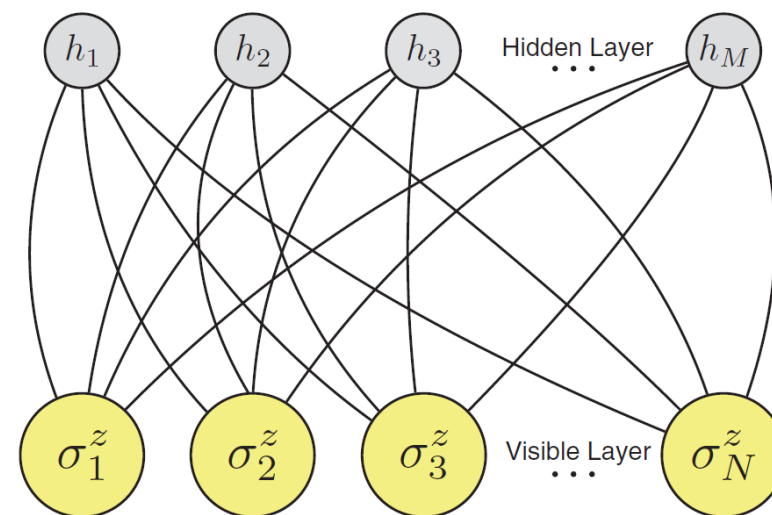
• 人工ニューラルネットワークを利用した量子多体問題ソルバー

G. Carleo, M. Troyer: Science **355**, 602 (2017). 被引用数: **2900超** by Google

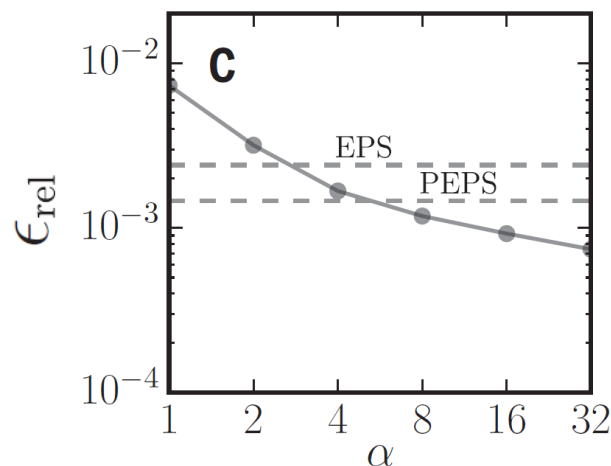
★制限ボルツマンマシン (RBM) を変分波動関数として導入

特徴：計算コストの発散を抑えながら隠れ層の自由度がすべての物理自由度と直接結合

- 非局所的な長距離相関を直接反映
- 高いエンタングルメント状態にアクセスが容易



• ベンチマーク



モデル：2次元横磁場イジング模型（10x10サイト）

ϵ_{rel} ：基底状態エネルギーの相対誤差

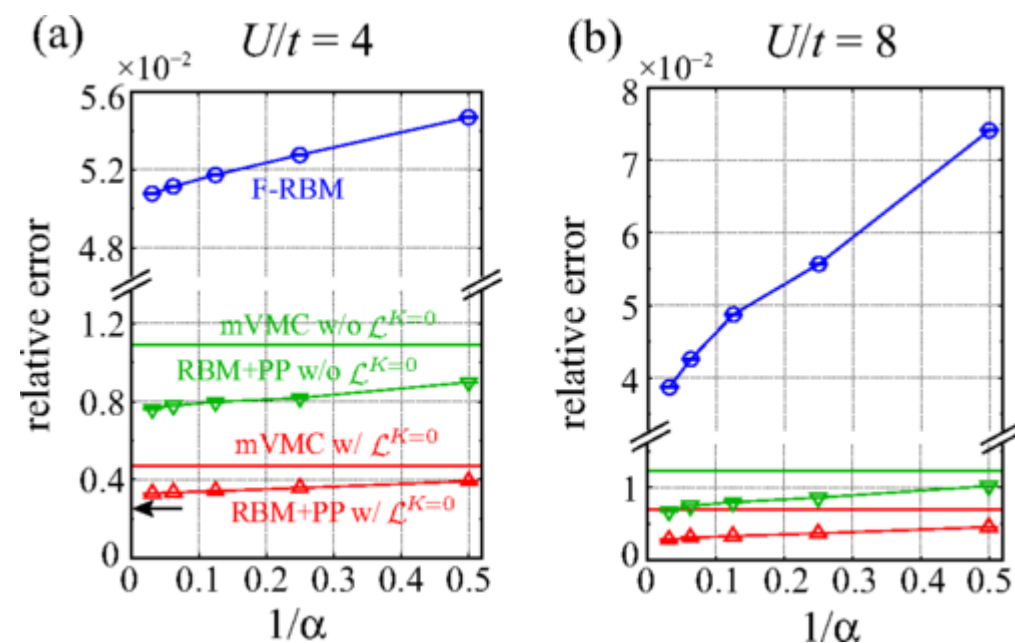
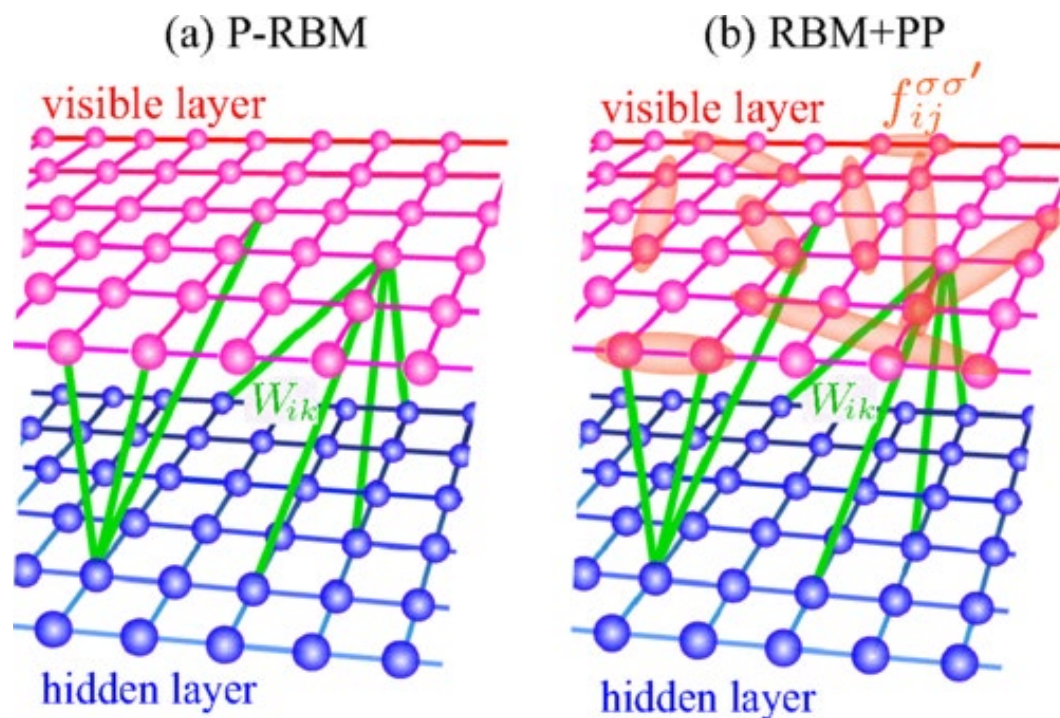
α ：隠れ変数密度（全部で αN 個の変分変数）

PEPS：TN法の当時のトップデータ

• 電子系（ハバード模型）への応用

Y. Nomura, A. S. Darmawan, Y. Yamaji, M. Imada, Phys. Rev. B **96**, 205152 (2017). 被引用数: 470超 by Google

★物性分野で洗練化された変分モンテカルロの技術が転用できた（展開基底の調整や対称性の考慮）



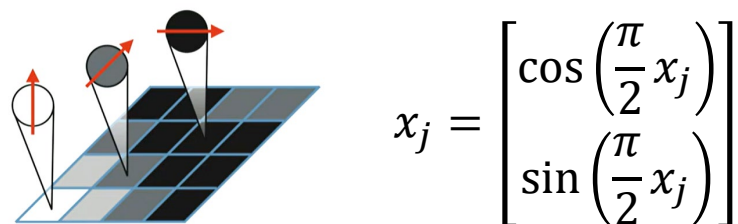
正方格子上的 2D ハバード模型 (8x8 サイト, 1/2 フィリング)

既存の変分モンテカルロの結果を超えた精度を達成

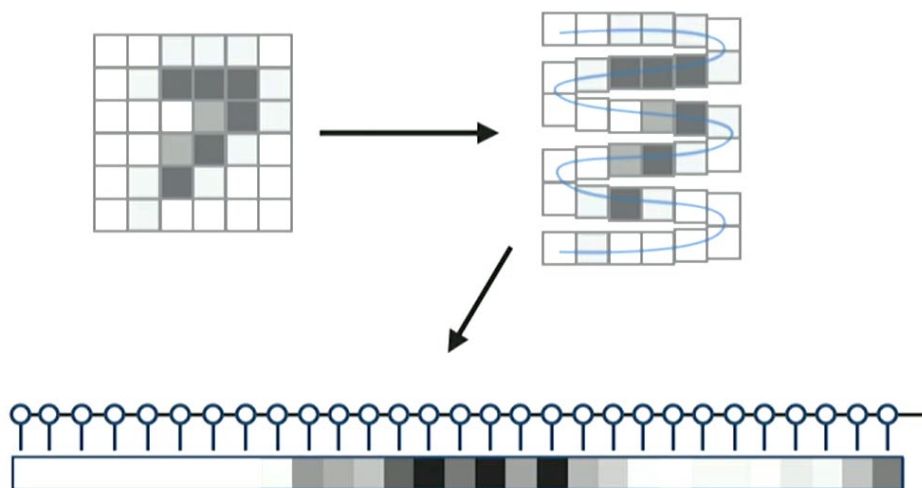
• TNによる教師あり学習

E. M. Stoudenmire, D. J. Schwab, Adv. Neural Inf. Process. Syst. 29, (2016). 被引用数: 770超 by Google

ピクセル→ベクトルへのマッピング



★高次元の特徴量空間を行列積状態で表現



MNISTにある手書き文字の認識：



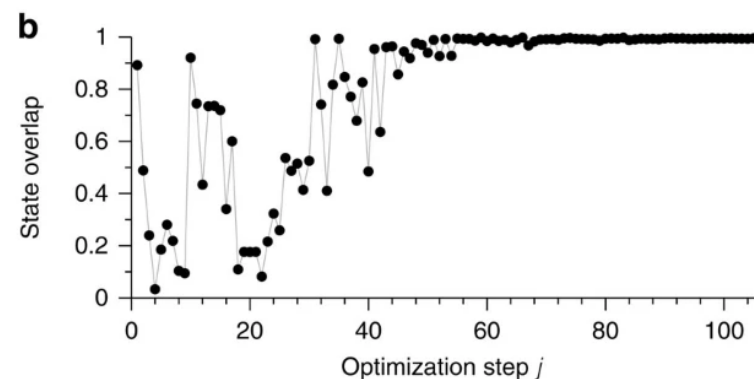
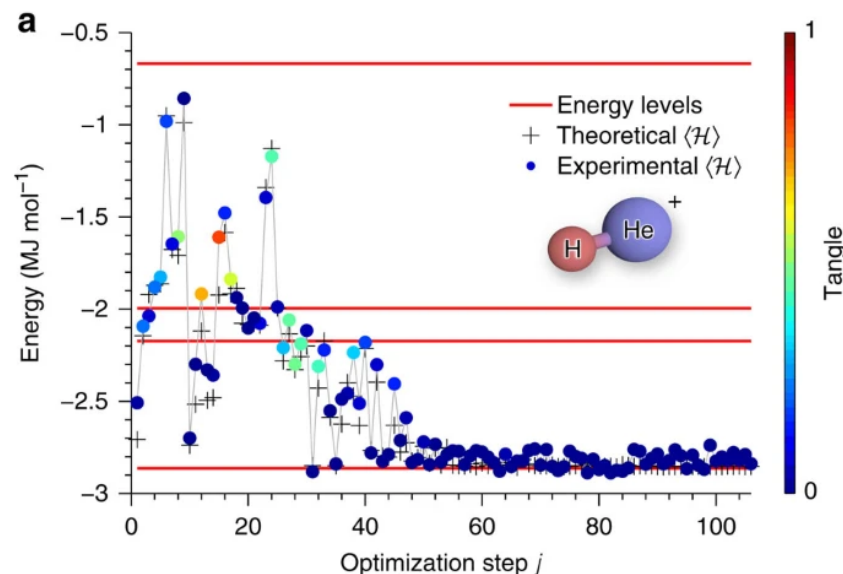
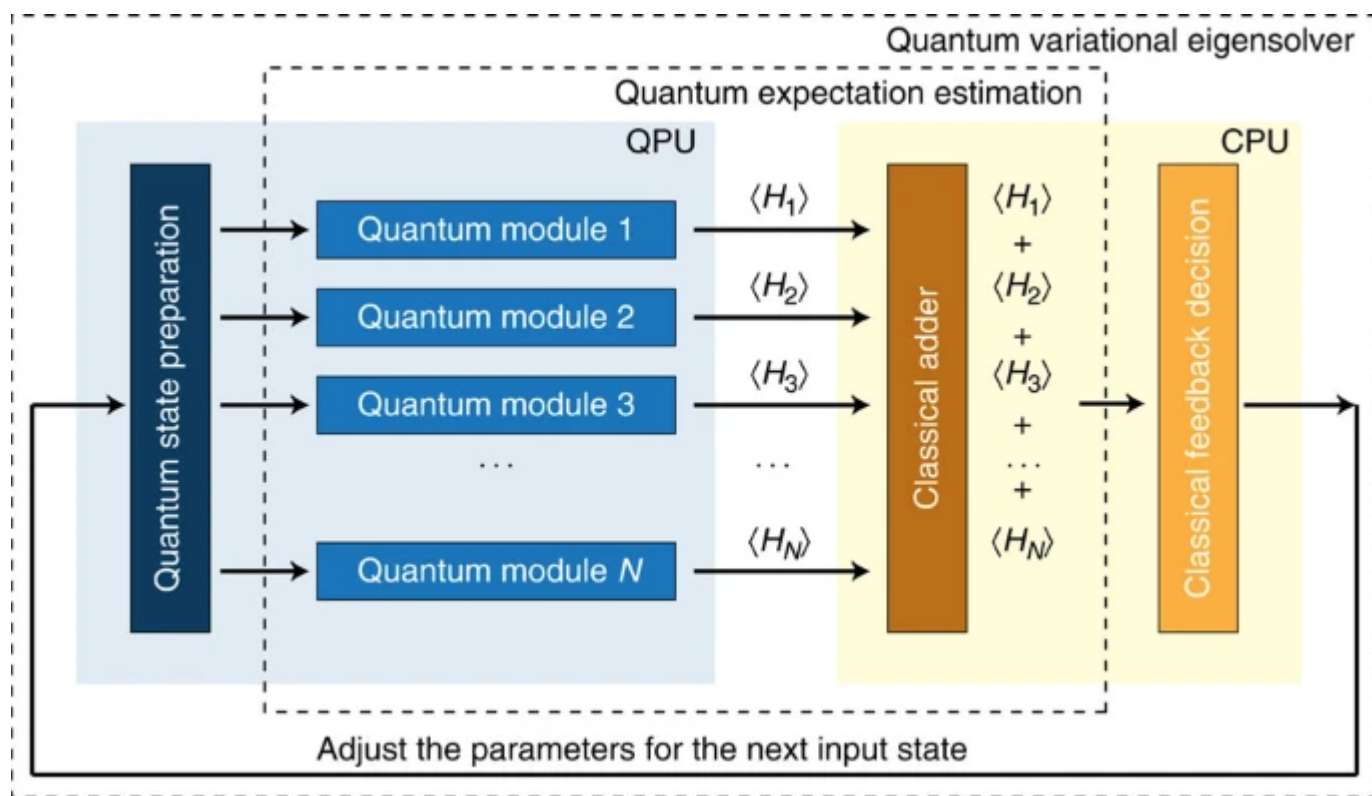
Bond dimension	Test Set Error
m = 10	~5% (500/10,000 incorrect)
m = 20	~2% (200/10,000 incorrect)
m = 120	0.97% (97/10,000 incorrect)

<https://www.youtube.com/watch?v=T23Ld3O7xjs> より抜粋

量子変分固有値ソルバー

A. Peruzzo, et al., Nat. Commun. **5**, (2014). 被引用数: **5900超** by Google

従来型計算機で難しい評価量 ($E = \psi^\dagger H \psi$) を
量子実機 [この論文では光学系] に任せる

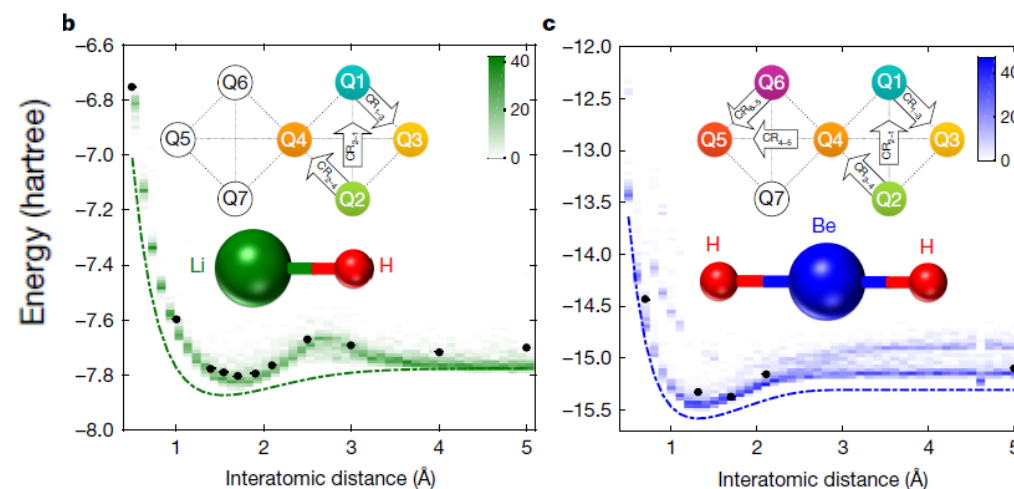
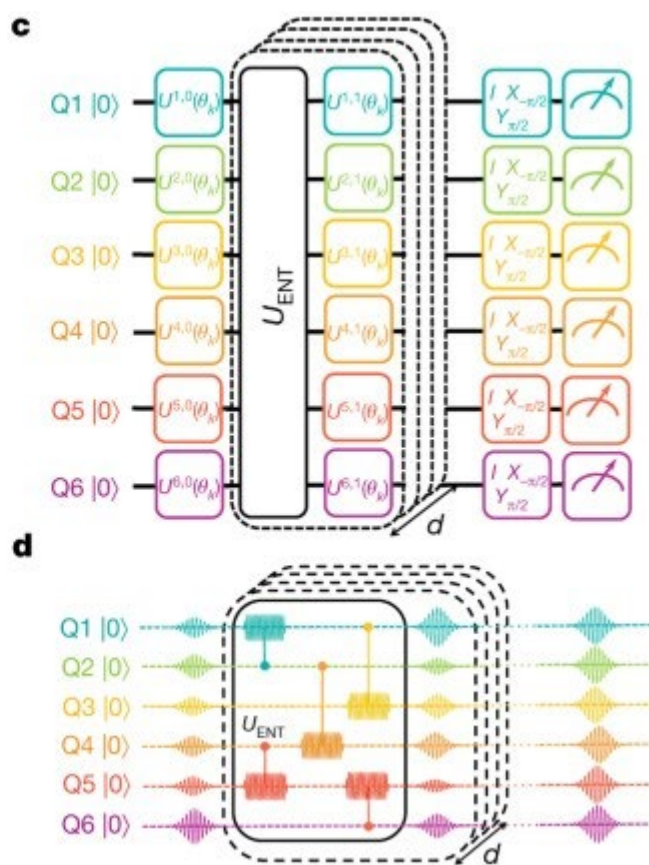
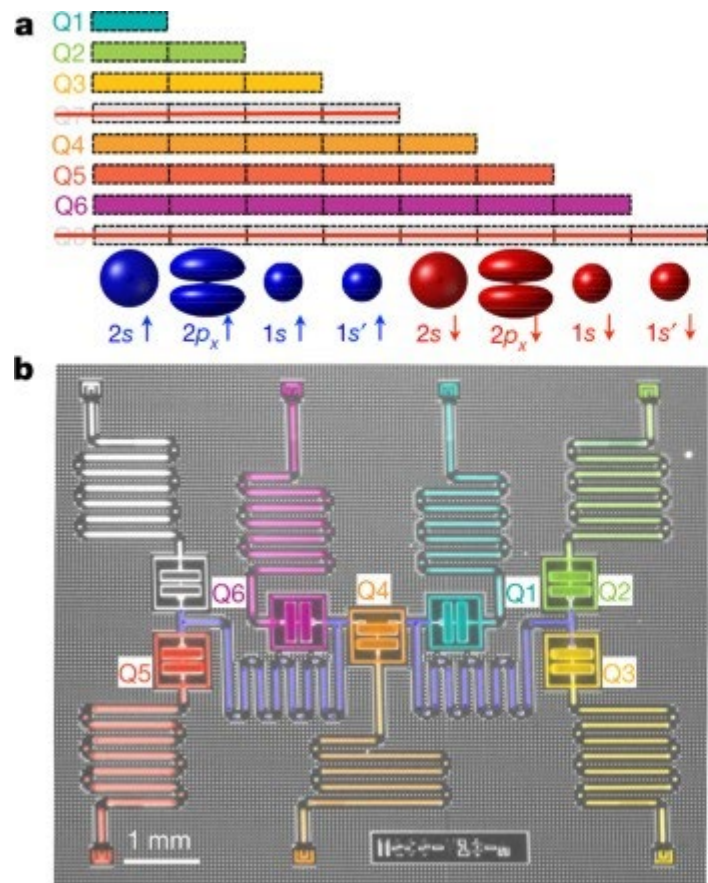


2量子ビット系でのベンチマーク

・実機構造に即した変分関数

A. Kandala, et al., Nature **549**, (2017). 被引用数: 3800超 by Google

超伝導実機によるVQE計算。量子ビット間の結合性とマッチした変分関数の設計。



最大6量子ビット系でのベンチマーク

Q : どのタイプの実機が将来有望か？

A : 正直なところよくわからない

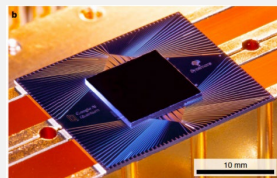
Q : 既存のHPCとどうやって組み合わせるか？

「量子有用性」時代に突入

20

Nature, 2019

量子超越性
(53量子ビット)



特定の計算タスクで従来型コンピュータの性能を凌駕すること（実用的な問題である必要はない）

Nature, 2019

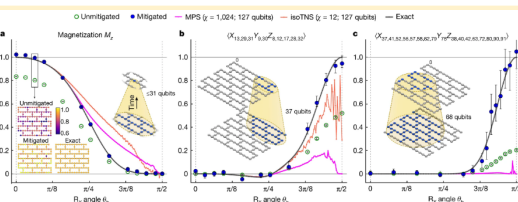
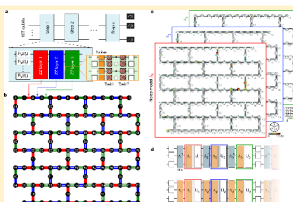
量子優位性



現実の応用で従来型コンピュータの性能を凌駕すること（対象・アルゴリズムともに極めて限定的）

Nature, 2023

量子有用性
(133量子ビット)



横磁場イジング模型の量子ダイナミクス計算
Nature **618**, 500 (2023).

古典のヒューリスティクス：テンソルネットワーク（TN）を採用

応用対象・アルゴリズムを現実の問題に柔軟に対応させて、対象の理解・実践的なアルゴリズム開発の両面に進歩をもたらすこと

★量子実機の発展がTNの発展も急速に促した

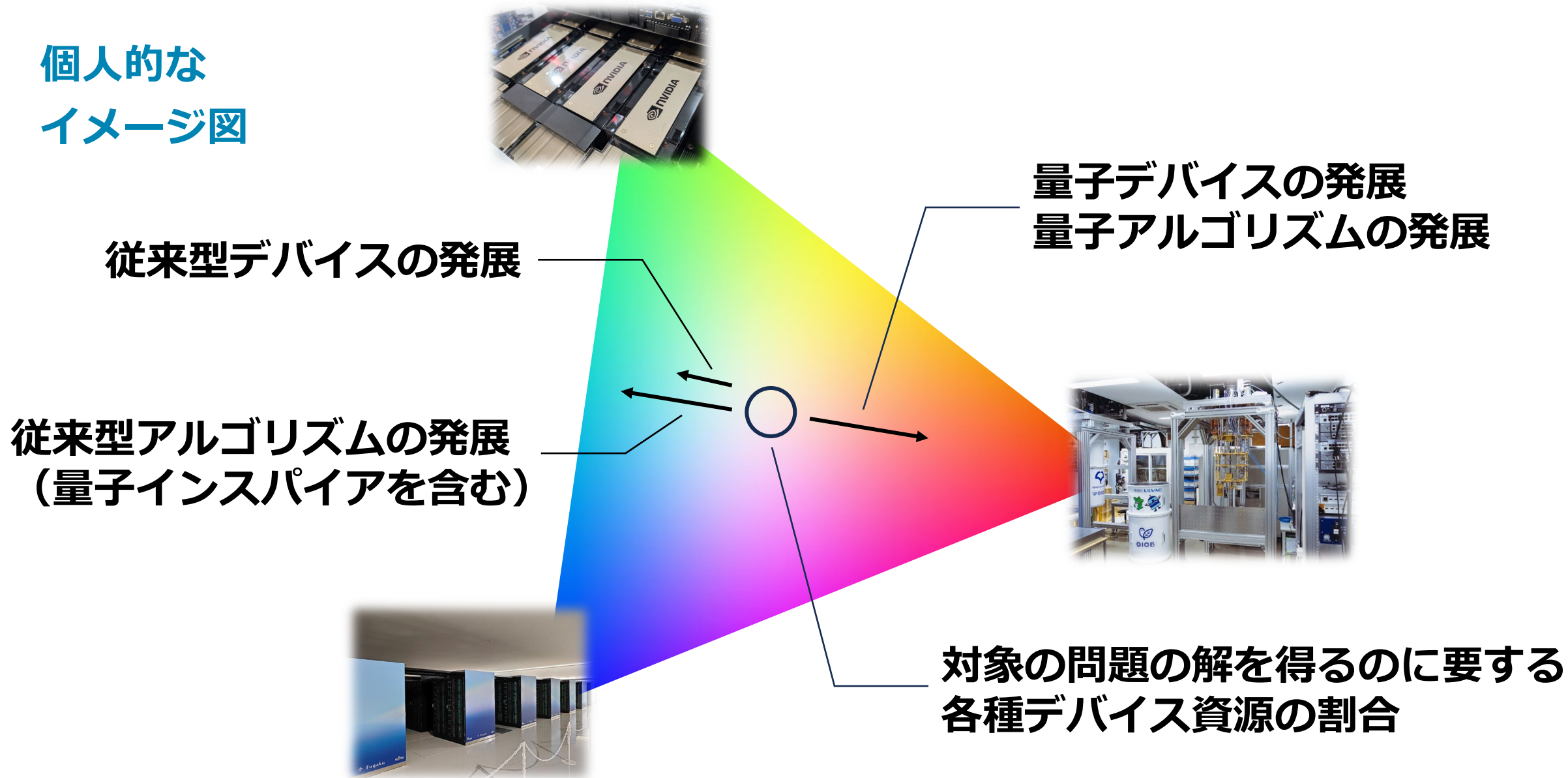
★TNの発展が量子アルゴリズムの発展に寄与している

コデザインの時代へ

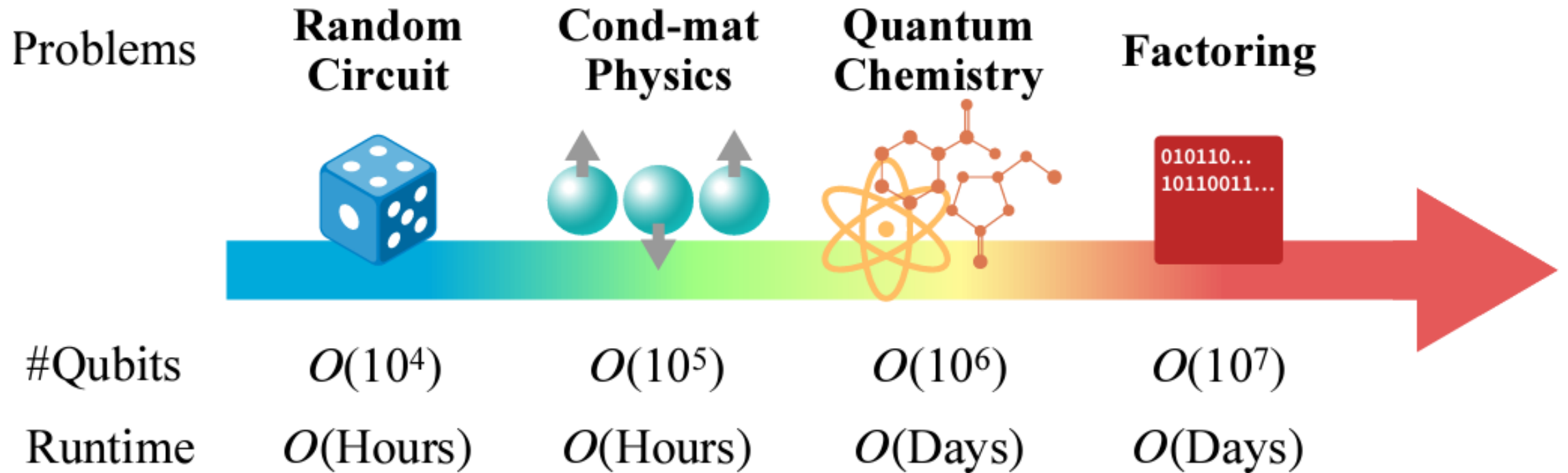
「量子有用性」 ≡ 「クロスオーバー」

21

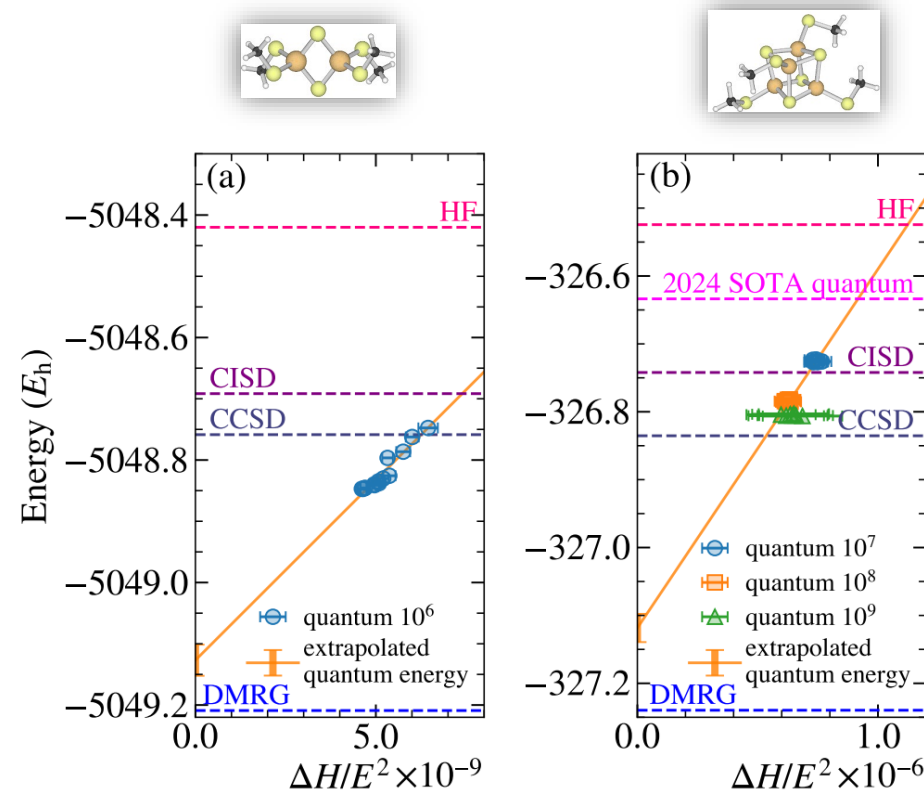
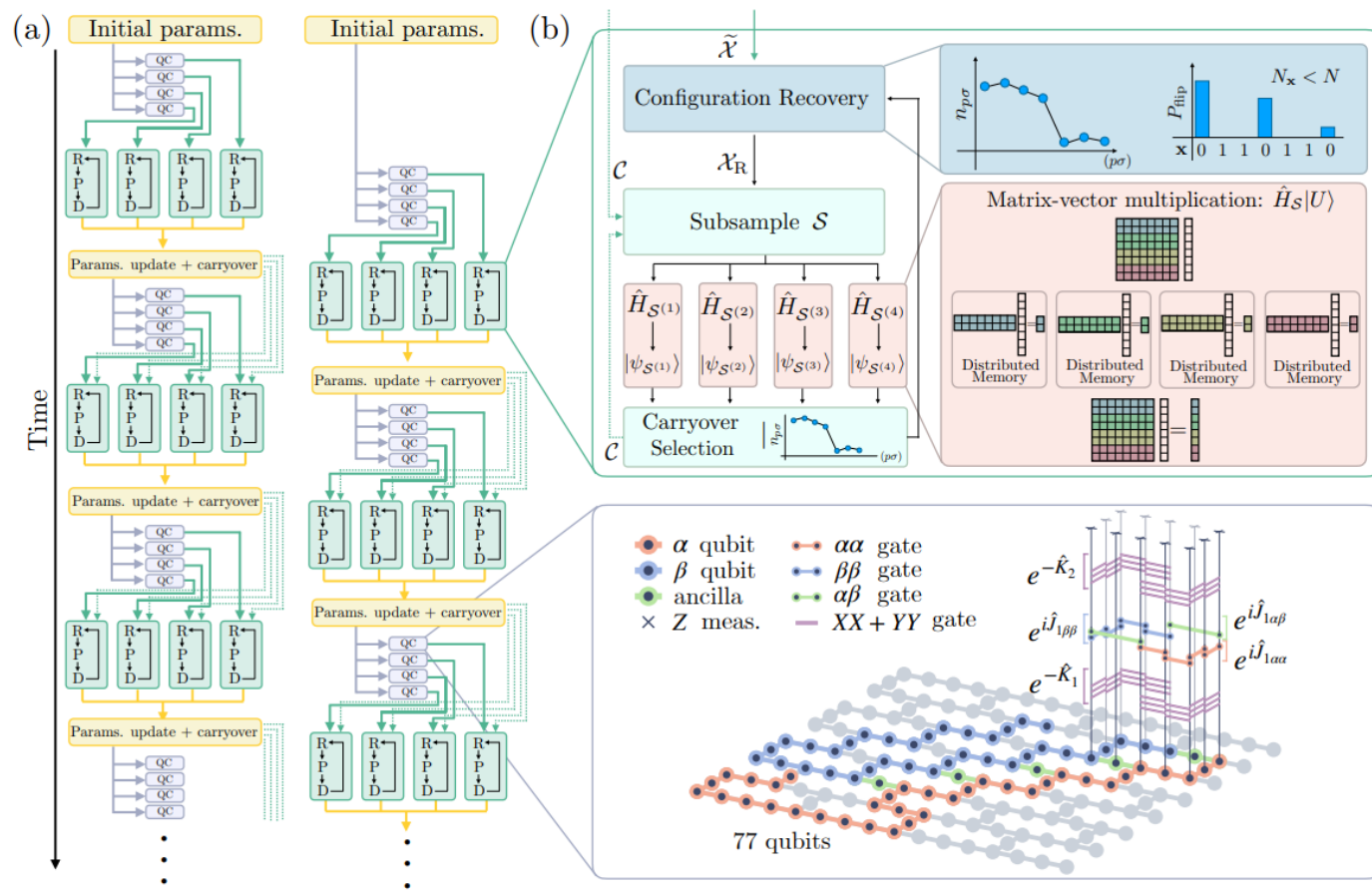
個人的な
イメージ図



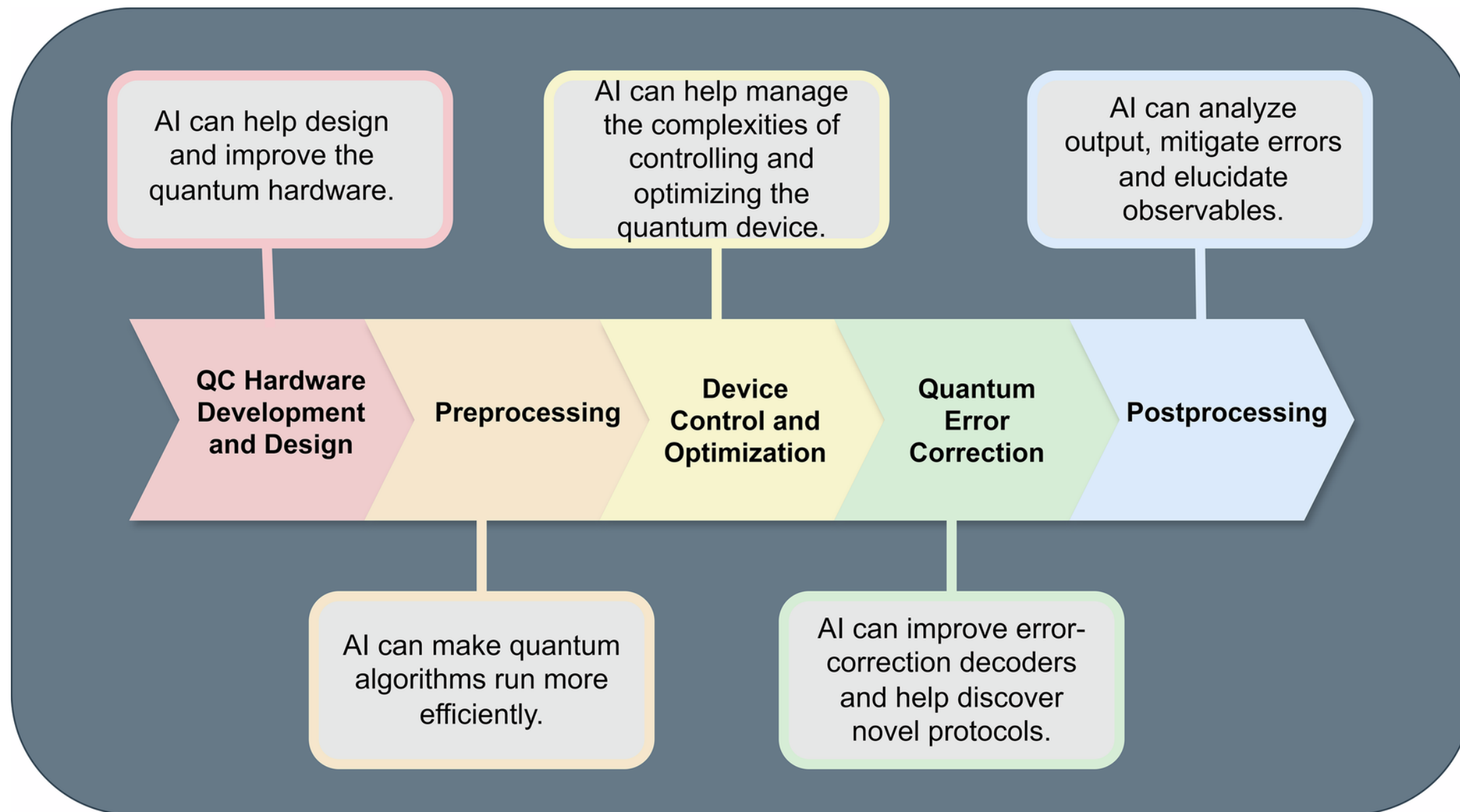
量子アルゴリズムのテストケースとしての立ち位置 22



量子計算機 (ibm_kobe, Heron) とスパコン (富岳) を完全に統合し、現実的に難しい電子構造問題に対して
前例のないスケールで閉ループ最適化を実現
T. Shirakawa, et al., arXiv:2511.00224 (2025).



最大72量子ビット計算
並列ノード数：152,064



● 理研&IBM 量子化学分野における量子有用性検証の達成

*IBMより
<https://www.ibm.com/quantum/technology#roadmap>

● 量子HPC連携による量子優位性検証*



CREST

200論理量子ビット級
誤り耐性量子コンピュータ(FTQC)の提供*

2025

2026

2027

2028

2029

2030

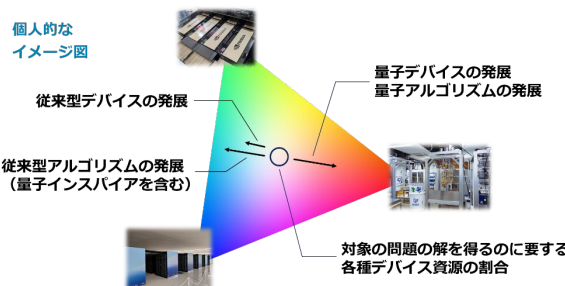
2033+



富岳NEXT

- 量子HPC連携は、実機の大規模化に伴い今後ますます需要が増加する
状態準備、回路最適化といった量子⇔古典データ変換に大きなコストが必要
- 解くべき問題の立ち位置の明確化が
より重要に
- AIのサポートはあらゆる判定・最適化
の場面で重要

2K論理量子ビット級FTQC*
本格的な社会実装



「AI×FTQC×HPC」で
到達できる新しい
計算可能領域の開拓が重要