

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： テンソルネットワーク状態を活用した量子多体系基底状態計算手法の開発

2. 個人研究者名

大久保 毅（東京大学大学院理学系研究科 特任准教授）

3. 事後評価結果

当初の構想はテンソルネットワークの知見を直接生かすことによりスーパーコンピュータを凌駕する NISQ 型量子コンピュータによる量子多体系の解析手法を開発することであった。研究を実施する中で NISQ の計算能力の制約が大きいことを見出した。この問題に対処するために古典コンピュータ上のテンソルネットワークと NISQ を組み合わせる新しい量子-古典ハイブリッドアルゴリズムを提案した。本提案は物性物理では一般的な並進対称性を仮定している。提案したアルゴリズムが機能するための条件として、古典的なテンソルネットワークが長距離相関を適切に表現できること、これに NISQ で取り扱える程度の小規模な量子回路を付加することで短距離相関を適切に表現できること、テンソルネットワークに量子回路を付加した無限量子多体系の物理量が計算可能であることを明確にした。さらに、2次元ハニカム格子上のキタエフ模型という具体的な例で上記の条件が実現できることを示唆する結果を得ている。また、多くの場合物理量の計算に必要な最適化の精度が量子力学的表現の精度やエネルギーの精度よりも低くても有用であるという知見に基づいて、物理量の計算アルゴリズムに平均場近似の考えを取り入れた Bond-weighted Tensor Renormalization Group 法を提案した。本量子-古典ハイブリッドアルゴリズムは古典コンピュータを精度・規模で凌駕する可能性が示されている。以上のことから、本研究の目的は達成されたものと評価できる。

本研究は基本的に個人研究であった。配分された研究費はシミュレーションなどの計算資源に効率的に活用されている。また、本領域で行った講習会や領域セミナーにも積極的に参加し、他のさきがけ研究者らとの議論や共同研究を行っており、その結果が本プロジェクトでの成果にも表れている。

本研究は量子-古典ハイブリッド計算で NISQ を活用しながら従来のスーパーコンピュータを凌駕する可能性を示しており、高く評価できる。本手法は長距離相関を古典的に計算可能な量子状態に担わせ、短距離相関による補正を NISQ で行うもので一般的な量子-古典ハイブリッド計算アルゴリズムの設計指針として有効であると思われる。さらに、本研究では研究者のこれまでの物性物理の研究における経験や知識が、一般的な概念を具体的な計算アルゴリズムに実体化する際に本質的な役割を果たしており、異分野の研究者が量子情報研究に取り組むことによってブレークスルーが起きる可能性を示している。一方で、提案されたアルゴリズムの実証においては NISQ 部分の検討をさらに進める必要があり、今後の発展に期待する。

本研究を遂行する過程で2次元量子系の基底状態の計算や物理量の計算を行う古典的なテンソルネットワークのソフトウェアを整備し、オープンソフトウェア TeNeS として公開し、広く活用されることを目指してハンズオン講習会も実施している。このことはテンソルネットワーク計算の物性物理への応用に貢献するものであり評価できる。

本研究からの派生として、物性物理において基本的な格子模型で量子優位性が現れる問題のサイズを検討した。従来議論されていた量子化学の問題よりも小さい100スピン程度で量子優位性が現れることを示した。この研究は異なるバックグラウンドを持つ、さきがけ領域の研究者の共同研究によって得られた。異分野協働の有効性を示している本研究者も物性理論の専門性を生かして貢献した。

なお、本研究者はプロジェクト期間中に東京大学大学院理学系研究科特任准教授に昇任した。