

研究終了報告書

「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」

研究期間：2019年10月～2023年3月

研究者：大久保 毅

1. 研究のねらい

近年のゲート型量子コンピュータ開発の急速な進展により、近未来に、数百量子ビットを備えた量子コンピュータの実用化が期待されている。一方で、近い将来に実現する量子コンピュータは、誤り訂正が十分ではなく、種々のノイズの影響下にある Noisy-Intermediate Scale Quantum Computer (NISQ) と呼ばれるものであり、この NISQ を用いて有用な計算がどのように行えるかについて、非常に活発な研究が行われている。本研究では、特に、NISQ を量子多体系の解析に用いることで、従来の古典計算機ではアプローチできない規模の計算を行える可能性に期待し、NISQ を有効に利用するための研究開発を行った。

一般に、量子多体系状態を古典計算機上で厳密に表現しようとした場合、粒子数に対して指数関数的に大きくなる状態空間を取り扱う必要があり、最先端のスーパーコンピュータを用いてさえ、 $S=1/2$ の量子スピン 50 個程度しか扱えない。しかし、量子状態を小さなテンソルのつながり、テンソルネットワーク、でコンパクトに情報圧縮して表現することで、大規模な量子多体系の低エネルギー状態を、古典計算機を用いて高精度に計算できるテンソルネットワーク法が近年発展している。

本研究の狙いは、古典計算機での最先端アルゴリズムである、このテンソルネットワーク法を基盤とした、NISQ による量子多体系の解析手法を開発することにより、テンソルネットワーク法の自然な拡張として、NISQ を用いたアルゴリズムを実装し、古典計算機を上回る性能を実現することであった。テンソルネットワーク表現の高効率性は、量子多体系の低エネルギー状態に期待されるエンタングルメントエントロピーの面積則により基礎付けられている。量子多体系の低エネルギー状態の解析に焦点を当てることで、この知見を NISQ での量子回路の構成に積極的に活用し、演算できるゲート数に制限がある NISQ で量子回路構造をコンパクトに保ったまま、古典計算機を超える規模・精度での量子多体系問題の解析手法の確立を目指した。

2. 研究成果

(1) 概要

本研究では、テンソルネットワークを基盤とした、NISQ を用いて量子多体系の低エネルギー状態を解析する手法の確立を目指し、具体的な達成目標として

- エネルギー精度と量子回路構成の関係の解明
- 高次元量子スピンモデルの基底状態計算に有効な量子回路の開発
- 無限系の波動関数を最適化するアルゴリズムの構築

の 3 点を掲げて、研究開発を行った。これらの達成目標は相互に関連しているため、各項目について必ずしも独立した研究成果が対応している訳ではないが、最終的な成果として古典計算機でのテンソルネットワーク計算と、NISQ での量子回路最適化を組み合わせることで、無限に大きな高次元(二次元)量子多体系の解析を可能とする、「量子・古典エンタングルアルゴリズム」を考案し、このアルゴリズムを構成する各要素技術の開発・精密化を行うこと

で、上記の目標を達成した。

量子・古典エンタングルアルゴリズムでは、古典計算機で成功しているテンソルネットワーク状態に、量子回路を付加することにより、さらに表現能力を増した量子状態の試行関数を構成し、量子回路部分を NISQ を活用して最適化することで、古典計算機、または、NISQ 単独での利用に比べて高精度な解析を可能となることを期待している。このアルゴリズムが実際上有効に働くためには、(i)ターゲットとなる量子多体系に並進対称性がある、(ii)基盤となるテンソルネットワーク状態が長距離の量子エンタングルメントを適切に捉えている、(iii)追加された量子回路を NISQ で取り扱える程度の小規模クラスターで適切に最適化可能である、(iv)テンソルネットワークに量子回路を付加した無限系の量子状態で物理量が計算可能である、という4点の確認が必要である。本研究では、(i)を満たす量子多体系の例として主に二次元ハミカム格子上的キタエフ模型に注目し、適切にデザインされたテンソルネットワーク状態が(ii)を満たした上で、量子回路として実現できることを示した。また、古典計算機を用いた数値計算により、少数クラスターでの最適化した量子回路を、量子状態の並進対称性を利用して無限系に拡張することで、(iii)の性質を満たすことも示した。(iv)についても、テンソル繰り込み群法の手法改善を行うことで、計算量を増大させずに計算精度を大幅に向上できることを示した他、モンテカルロ法に基づくサンプリングによって統計誤差を含む形で無限系の物理量を計算する手法を考案した。

以上の研究により、量子・古典エンタングルアルゴリズムが想定通りに働く例を明示することに成功し、このアルゴリズムの構築を通して、目標 1,2,3 を、達成できたと考えている。

(2) 詳細

本研究では、テンソルネットワークを基盤とした、NISQ を用いて量子多体系の低エネルギー状態を解析する手法の確立を目指し、具体的な達成目標として

1. エネルギー精度と量子回路構成の関係の解明
2. 高次元量子スピン模型の基底状態計算に有効な量子回路の開発
3. 無限系の波動関数を最適化するアルゴリズムの構築

の3点を掲げて、研究開発を行った。

ここでは、本研究の主要な成果について、その中心となる、量子・古典エンタングルアルゴリズムと、各要素技術の詳細を説明する他、さきがけ領域内の研究者との共同研究により行った、物性物理分野での量子優位性の実現に関する研究も紹介する。

成果1「量子・古典エンタングルアルゴリズムの提案」(達成目標 1,2,3 全てに関連)

利用可能な量子ビット数、量子ゲート数に制限がある NISQ を用いて、無限系を直接取り扱えるテンソルネットワーク法に代表される、古典計算機での強力なアルゴリズムに優る規模・精度で量子多体系の低エネルギー状態を解析することは、NISQ の単独利用では実現が難しい。本研究では、古典計算機単独、NISQ 単独での利用に比べて高精度な解析を可能とするアルゴリズムとして、古典計算機で成功しているテンソルネットワーク状態に、量子回路を付加することにより、さらに表現能力を増した量子状態を、NISQ を活用して最適化する、「量子・古典エンタングルアルゴリズム」を考案した。

考案した量子・古典エンタングルアルゴリズムでは、以下の4つのステップを通して、量子

多体系の基底状態を解析する。

1. 古典計算機での最適化や、事前知識による解析的な表現から、注目する量子状態の長距離のエンタングルメントを適切に捉えたテンソルネットワーク状態を準備する。特に、対象系に並進対称性を仮定し、無限に大きな系で有効なテンソルネットワーク状態を得る。
2. 準備したテンソルネットワーク状態を近似的、または、厳密に量子回路で表現することで、NISQ 上で実現可能にする。
3. NISQ 上で、少数クラスタの基底状態状態を Variational Quantum Eigensolver (VQE) などのアルゴリズムで計算する。ここでは、Step2 で構築したテンソルネットワーク状態を固定し、その上に、2量子ビットゲートなどで記述されるパラメタ付き量子回路を加えることで、エネルギー期待値を改善する。
4. Step 3 で得られた最適化された量子回路を大きな系(理想的には、無限系)に並進対称性を利用して拡大し、巨大なテンソルネットワーク状態を構築する。このテンソルネットワーク状態の物性を、古典コンピュータを用いて計算し、古典コンピュータや NISQ 単体では高精度には評価できない大きな系の基底状態物性を解析する。

このアルゴリズムの重要な点は、Step1 で構成するテンソルネットワークが、注目する量子状態の長距離のエンタングルメント構造を適切に捉えていることにある。実機の制約により NISQ では、大きな物理系を直接取り扱うことは不可能であり、Step 2 では比較的小さい量子系での最適化しか行えない。基礎物理として興味を持たれる量子相転移点近傍など、そもそも大規模な計算を行いたい領域では、一般には、小さい系の振る舞いには顕著な有限サイズ補正が含まれているため、小さい系で最適な量子回路表現を用いて、無限系の量子状態を構成しても、必ずしも精度が良いとは言えない。しかし、提案するアルゴリズムでは、重要な部分はテンソルネットワーク表現が既に担っていることが想定されており、その状況下では、追加された量子回路は比較的短距離相関からくる補正のみを表現すれば良く、小さい系で最適化した量子回路が無限系でも有効に働くと期待される。

このようにして無限系に拡張された量子状態は、これ以上の最適化を行わずに、Step 4 では、物理量の計算だけを行う点もアルゴリズムの要点である。一般に、最適化ステップでは、その安定性や、最終的な量子状態の表現精度に、高精度なエネルギー測定値が必要となる。一方で、物理の解釈の際には、最適化に比べると必要な精度は低く、統計誤差や系統誤差などを適切に解析できれば、物理の議論は可能になる。最適化と物理の解析で必要とされる精度の違いから生じる計算コストに注目することで、最適化はできないが物理量は見積もれる設定を実現し、NISQ と古典計算機を組み合わせることで、古典計算機に優る規模・精度で、物理の解析を可能とした。

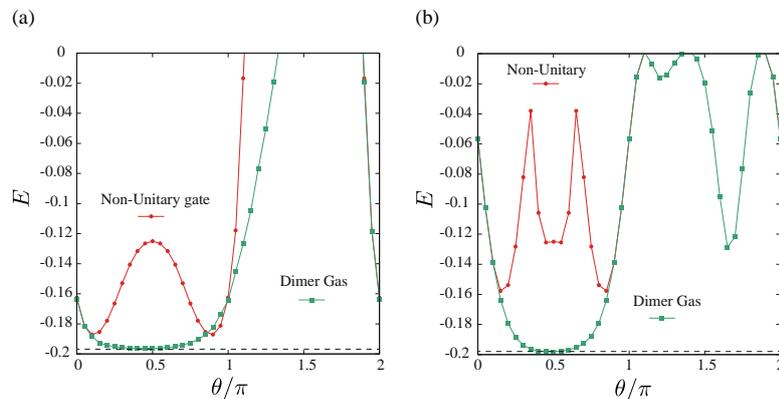
成果 2 「Kitaev 量子スピン液体での量子・古典エンタングルアルゴリズムの検証」(達成目標 2,3 に関連。論文準備中)

成果 1 で提案した量子・古典エンタングルアルゴリズムの有効性を検証するため、二次元ハニカム格子上的 Kitaev 模型のスピ液体状態を具体的なターゲットとして、Step 2、及び 3 の具体化をおこなった。

Step2 では、スピン液体の長距離相関を適切に捉えた、テンソルネットワーク状態として、Loop Gas 状態 (LGS) を採用し、LGS が局所的な保存量 (量子数) への射影演算子の積を初期状態に作用することによって生成される点に着目することで、LGS のテンソルネットワークが制御パウリゲートの積として記述できることを明らかにした。この量子ゲートの積はループ構造を持っているため、そのままでは量子回路として実現できないが、測定と組み合わせることで、この射影演算子を実現できることも示した。

Step3 では、LGS に新しくパラメタ付きの2量子ビットゲートを作用させることで、適切に短距離相関を表現できるかを検討した結果、少数の量子ゲートでは、無限系、24 サイトのクラスター (NISQ での最適化を想定したもの) の双方で、残念ながら、ほぼエネルギーの改善がみられないことが明らかになった。原理的には、演算する量子ゲートの層を増やすことで、エネルギーの低下が期待されるため、より多数の量子ゲートを演算した場合についてさらなる検証を進めている。一方で、少数の量子ゲートのみの場合でも、2量子ビットゲートとして非ユニタリ演算子を考えれば、大幅にエネルギーが低下することも明らかした。加えて、この場合には、24 サイトクラスターでエネルギーを最小にする量子ゲートのパラメタが、無限系での最適パラメタと非常に近いことも示

(a) することができた (図 1)。この結果は、適切な量子ゲートを準備できれば、古典・量子エンタングルアルゴリズムが想定通りに実現できることを示唆している。



成果 3 「テンソルネットワーク法による基底状態計算アプリの高度化と公開」(達成目標 3 に関連。成果論文[1])

図 1. (a)非ユニタリゲートを用いた場合の無限系でエネルギーのパラメタ依存性 (b) 24 サイトクラスターの場合。

量子・古典エンタングルアルゴリズムでは、Step1、Step 4 で古典計算機による計算を行うため、提案するアルゴリズムを実行するには、テンソルネットワーク法の計算アプリが必要となる。さきがけ期間中に、従来から研究に用いていた二次元無限系の量子スピン模型に対するテンソルネットワーク法の計算コードの入出力とマニュアルを整備し、スパコンの利用を想定し大規模な分散メモリ並列に対応したオープンソースソフトウェア TeNeS として公開した。この TeNeS を用いることで、種々の二次元量子系の基底状態をテンソルネットワーク法で計算し、量子・古典エンタングルアルゴリズムの Step1 を担うことができる。それだけでなく、与えられたテンソルネットワーク状態の物理量計算に、通常用いられる高コスト・高精度の角転送行列法だけでなく、平均場近似を用いた低コスト・低精度の手法まで対応させることで、Step 4 にも効果的に使えるように工夫した。さらに、研究成果を広く利用してもらう目的で、TeNeS に関するハンズオン講習会も開催した。

成果 4 「テンソル繰り込み群法の拡張による物理量計算の低コスト・高精度化」(達成目標 3 に関連。成果論文[2])

量子・古典エンタングルアルゴリズムの Step 4 における物理量の計算は、テンソルネットワークの近似的な縮約の問題になる。通常のテンソルネットワーク状態の縮約計算では最適化に使うことも見据えて、精度を最重要視するが、Step4 のアプローチでは低コストでそれなりの精度の計算を行うことが重要になる。テンソル繰り込み群と呼ばれる方法は、低コストで大規模な計算ができる一方で、精度が不十分なため、従来は、テンソルネットワーク状態の物理量計算に用いられていなかったが、本研究では、平均場近似の考え方を拡張することにより、テンソルネットワークのボンドに重みに対応するテンソルを導入し、それを通常のテンソルと同様に繰り込んでいく **Bond-weighted Tensor Renormalization Group (BTRG)** を提案した。古典イジング模型の自由エネルギーに対してこの BTRG を適用した結果、ボンド重みの重要度に関連するパラメタ k を適切に選ぶことで、高コスト・高精度の HOTRG 法に比べて、低コストのまま精度を 1 桁程度向上できることを示した(図 2)。

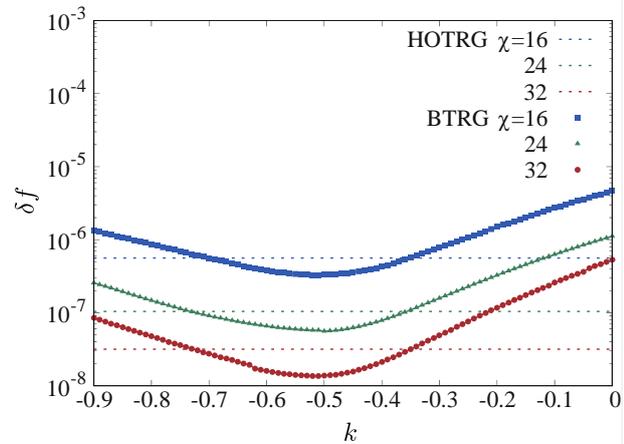


図 2. 二次元古典イジング模型の自由エネルギー誤差のパラメタ k 依存性。成果論文[2]より。

成果 5 「物性物理の問題における量子優位性の探索」(さきがけ研究者らとの共同研究。成果論文[3])

本さきがけ研究では、近未来に実現する NISQ を用いて、古典計算機でのテンソルネットワーク法に優る計算を行うためのアルゴリズムを構築したが、このテーマでは、視点を変えて誤り耐性量子コンピュータに注目し、物性物理での研究対象であるような格子模型の計算で量子計算機の優位性が現れる状況の推定を行った。本さきがけ内の共同研究者は、一期生の水上氏、鈴木氏、および 3 期生の吉岡氏であり、私は主に、テンソルネットワーク法を用いた古典計算での計算時間のスケーリング解析とその外挿を担当した。

物性物理の基本的な模型である正方格子ハイゼンベルグ模型と、正方格子ハバード模型でこの古典計算機での計算時間の見積もりと、共同研究者らが行った量子位相推定に必要な qubit 数と実行時間の見積もりを比較した結果、量子計算機の優位性が、100 スピン程度、または 100 電子程度の比較的小サイズの問題で現れ、また、その実行時間も 1 日程度になることを示した(図 3)。これらの見積もりは、先行して調べられていた量子化学の問題に比べて一回り小さく、物性物理の問題解析に、誤り耐性量子計算機が非常に有効であることを明らかにした。

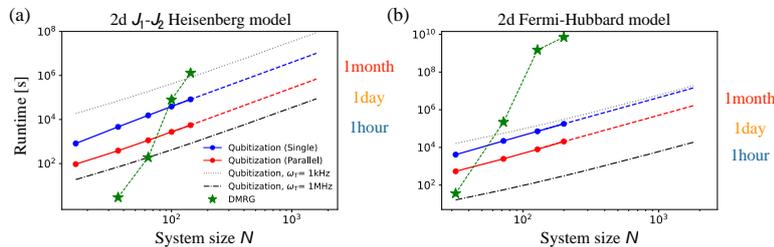


図 3.古典計算と量子位相推定の実行時間の推定(a)正方格子ハイゼンベルグ模型(b)正方格子ハバード模型。 arXiv:2210.14109 より。

3. 今後の展開

古典計算機と NISQ と高度に組み合わせた量子・古典エンタングルアルゴリズムにより、古典計算機単独での規模・精度を超えて、量子多体系の基底状態が解析する道を拓くことができました。近い将来 50qubit を超える NISQ が気軽に使えるようになれば、開発したアルゴリズムを用いて、物性物理の非自明な問題の解析に適用できると期待している。また、同様のアイデアで、基底状態だけでなく、有限温度の量子状態(混合状態)の大規模計算もできるのではと考えており、その方向での量子・古典エンタングルアルゴリズムの拡張も検討している。

5-10 年程度で十分な規模の NISQ 実機を使用できるようになれば、キタエフ模型をはじめとした新奇物性の源となる模型の解析がこれまで以上に進むことが期待され、現状のスパコンでは解明できていない、量子もつれの強い状況での非自明な基底状態の実現や、その安定性、さらには、上記の有限温度状態の手法拡張と組み合わせ、熱ホール伝導などの伝導現象の解明も行える。これらの展開は、このような理想的な模型にちかい物質の探索を押し進めることにもつながり、20 年-30 年後の強い量子もつれを起源とした新しい機能物質の開発に発展してくると期待している。

4. 自己評価

【研究目的の達成状況】

研究開始後に、当初に思い描いていたよりも NISQ で実用的な計算を行えるゲート数などの制約が大きいことが徐々に明らかとなった中で、最終的に古典・量子エンタングルアルゴリズムを考案し、NISQ と古典計算機を高度に組み合わせることで、古典計算機を単独で利用するよりも大規模・高精度な基底状態計算が可能な枠組みを立てられた点は評価したい。このアルゴリズムにより、高次元の量子多体系でも使える、テンソルネットワークと高度に融合した量子回路の設計指針を与えることができ、また、並進対称性を活用することで、古典計算機でのテンソルネットワーク法と同等に、無限系の量子状態を解析できるようになるなど、研究開始時に期待していた達成目標を満たすことができた。また、このアルゴリズムの各要素技術として開発した手法、オープンソースソフトウェアは、NISQ が実用化される以前でも、古典計算

機を使った大規模・高精度計算として有効なものになっており、その点でも、最終的には、物性物理の未解明問題に挑みたいという、根源的な目標につながる成果が達成できたと考えている。

【研究の進め方】

本研究を進めるに当たっては、配分して頂いた研究費のかかなりの部分を古典計算機の資源に使用したが、それにより効率的に研究を進めることができ、十分に効果のある使い方ができたと考えている。新型コロナウイルスの影響により、当初の想定に比べると、国際学会への参加など、対面での研究成果発表の機会を十分に作れなかったが、最終年度になって、いくつかの招待講演の機会を得られた他、論文の Open access 費用も使用することができ、研究成果発表にも、研究費を適切に執行できたと考えている。

研究実施体制については、研究期間を通して、根幹となる部分については、基本的に本人のみで進めることになったが、当さがけの他の研究者と、様々な形で議論や、共同研究を行ったことで、効率的に研究を進められた。特に、複数のさがけ研究者と協力することで、当初の私の研究計画には含まれていなかった、誤り耐性量子計算が古典計算よりも優位となる物性物理の問題規模を明確にできた点は、本さがけに参加することで得られた、個人的にはとても大きな成果である。

【研究成果の科学技術及び社会・経済への波及効果】

本研究の成果である、古典計算機を活用するテンソルネットワークと NISQ を高度に組み合わせ、量子・古典エンタングルアルゴリズムの枠組みにより、将来的に、古典計算機単独では解析できなかったような量子多体系の物理を解明できるようになる可能性がある。本研究で具体的に検証した量子スピン系を例にすれば、研究成果の直接的な展開は、基礎科学としての量子相転移の物理の解明、理想的なモデルの解析を通じた、Kitaev スピン液体相などの新奇な量子相が実現する物質の探索などが考えられる。それらに加えて、このような新奇物質の機能を利用することで、熱ホール伝導現象を元にした整流素子や、特殊な素励起の制御による磁気メモリなど、実社会での応用につながるデバイス開発にも波及していくことが期待できるだろう。

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. Yuichi Motoyama, Tsuyoshi Okubo, Kazuyoshi Yoshimi, Satoshi Morita, Takeo Kato, and Naoki Kawashima, *TeNeS: Tensor network solver for quantum lattice systems. Computer Physics Communications*, 2022, 279, 108347-1-10.

無限に大きな二次元格子の上に定義された量子多体系の基底状態をテンソルネットワーク状態の一つである infinite Tensor Product State (iTPS) を用いて古典計算機で計算するための大規模分散メモリ並列に対応したオープンソースアプリ TeNeS を開発・公開し、その詳細を論文としてまとめた。

2. Daiki Adachi, Tsuyoshi Okubo, and Synge Todo, *Bond-weighted tensor renormalization group*, Physical Review B, 2022, 105, L060402-1-6.

与えられたテンソルネットワークの縮約を、実空間繰り込み群型の近似を用いて計算するテンソル繰り込み群 (TRG) と呼ばれる手法を拡張し、特異値分解によるテンソル近似の際に、テンソルの各足の重要度 (重み) を取り入れることで、計算コストを増やさずに大幅に近似精度を向上する手法を提案し、これまでに高精度手法として知られていた Higher-Order TRG よりも低コストなまま、より高精度な縮約が実現することを示した。

3. Nobuyuki Yoshioka, Tsuyoshi Okubo, Yasunari Suzuki, Yuki Koizumi, and Wataru Mizukami, arXiv:2210.14109.

物性物理学によく現れる、並進対称性があり、相互作用は短距離という量子多体系の基底状態を求める課題について、量子位相推定が、テンソルネットワーク法を用いた古典コンピュータによる計算よりも優位になる問題サイズを詳細に検討した。その結果、物性物理学の典型的な問題では、量子化学などのより複雑な相互作用系に比べて、比較的小さいサイズで量子コンピュータが優位になり、少ない量子ビット数、少ない実行時間で、量子コンピュータによる計算の恩恵が得られることを示した。

(2) 特許出願

研究期間全出願件数: 0 件 (特許公開前のものも含む)

(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)

主要な学会発表

1. T. Okubo, *Tensor network representation of Kitaev spin liquid and its application to quantum circuit-based variational calculations*, Novel Quantum States in Condensed Matter 2022, Kyoto, **Invited talk** (2022).
2. T. Okubo, *Tensor network approach to two-dimensional frustrated spin system*, APCTP-IACS-SNBNCBS Workshop on computational methods for emergent quantum matter: from theoretical concepts to experimental realization, India, **Invited lecture** (2022).
3. 大久保毅, *テンソルネットワーク法の量子多体問題への適用と量子計算機への展開*, 量子多体計算のフロンティア、大阪 (Zoom online), **招待講演** (2022).

著作物 (解説記事)

1. 大久保毅, *量子多体系とテンソルネットワーク*, 数理科学 2022 年 12 月号.
2. 大久保毅, *テンソルネットワークの将来*, 数理科学 2022 年 2 月号.