

研究終了報告書

「テンソルネットワークによる量子状態圧縮技術の高度化」

研究期間：2019年10月～2023年3月

研究者：上田 宏

1. 研究のねらい

近年、量子多体系に発現する物理の理解と応用が、エンタングルメントの概念と融合することで急速に進展している。この概念をいち早く取り込んだ「テンソルネットワーク(TN)法」と呼ばれる数値手法は、数理・統計・計算物理の分野に多大な貢献をもたらしてきた。今日では、量子回路シミュレーション分野へのTNの応用可能性が盛んに議論され、国内外で分野横断的な研究展開が続いている。近年IBMやGoogle等の巨大企業による量子計算機の熾烈な開発競争を受けて、その活用に資する量子計算アルゴリズム開発が急速に求められている。

そこで、本研究では空間的なエンタングルメントの構造に立脚して変分状態を構成するTN法の知見を活用して、量子計算機と古典計算機の混合環境下において堅牢に稼働するハイブリッド型の量子計算アルゴリズム開発を行う。具体的には、量子回路表現が与えられていない既知の古典的あるいは量子的情報を、特に物性/統計物理分野で洗練化されてきたTNの最適化手続きを利用して具体的な量子回路の表現に置き換える新規の振幅エンコーディング法を開発する。また、この技術をTN分野に逆輸入することにより、既存の物理的直感に強く依存しないエンタングルメント構造に立脚した非経験的TN構造の最適化を実現する。また、これらのアルゴリズムの有用性を1000量子ビット級の系で検証するための環境構築として、希薄粒子系にマップ可能な問題群の解析に特化した状態ベクトル型量子計算ソフトウェアの開発を行う。これらの技術開発を通して、量子情報処理技術基盤の高度化に資する。

2. 研究成果

(1) 概要

物性応用に適した高い対称性を持つ量子回路に特化した1000量子ビット級の数値的厳密シミュレーションを可能とする状態ベクトル型量子計算ソフトウェアQS³(キュー・エス・キューブ)を開発し[5. 主な研究成果リスト(1). 1]、ユーザーマニュアル整備を進め、GitHub上で公開した[5. 主な研究成果リスト(3). 1]。テンソルネットワーク(TN)法の状態最適化の知見を活用した勾配フリーの最適化手続きに従って、所望の精度の範囲で与えられた量子状態と等価な量子回路を生成する自動量子回路符号化アルゴリズム(AQCE)を開発した[5. 主な研究成果リスト(1). 2]。AQCEで得た知見を活用して、ツリーテンソルネットワーク(TTN)状態の範囲で状態のエンタングルメントを監視しながらTN構造最適化を動的に行うことで、任意の量子多体系の基底状態を最良近似しうるTN構造を探索するアルゴリズムを開発した[5. 主な研究成果リスト(1). 3]。

これらの成果に付随して、任意の古典イジング模型において、無限小の量子的相互作用を新たに導入することで系の低エネルギー状態を高速に探索するQuantum inspiredなアルゴリズムも開発し、並行して既存のTN法の高度化も実施した[5. 主な研究成果リスト(1). 研究期間累積件数: 13件に含まれる文献参照]。また、本さがけ領域研究を通じて得たTN法のより

俯瞰的な知見の一部は、Journal of the Physical Society of Japan の招待レビュー論文[5. 主な研究成果リスト(3). 2]、数理科学の特集記事[5. 主な研究成果リスト(3). 3]、並びに関連する研究会での招待講演[5. 主な研究成果リスト(3). 4,5]にて報告した。

以上の成果を通して、量子計算機と古典計算機の混合環境下において稼働するハイブリッド型の量子計算アルゴリズム開発並びにその周辺環境の整備化を実現し、量子情報処理技術基盤の高度化に貢献した。

(2) 詳細

研究テーマ A 「1000 量子ビット級の状態ベクトル型量子計算ソフトウェア開発」

従来の状態ベクトル型量子計算ソフトウェアは、計算の万能性を重視して、図 1 のグレーの領域に示す数 10 サイトの量子多体系の計算を高速に処理することが主眼であった。本研究テーマでは、ノイズを含んだ量子計算機 (NISQ) の近年の顕著な発展に追従可能な新たな量子計算ソフトウェアとして 100~1000 量子ビット超の大規模量子多体系に焦点をあてた非従来型の状態ベクトル型量子ソフト QS³ を

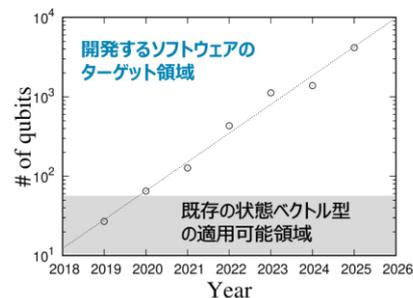


図1：開発ロードマップ(IBM Quantum, 2022)

開発した。これは、後述のテーマで開発するアルゴリズムの検証を同様の大規模系で実証する際にも重要となってくる。0 ケットの海の中に希薄に 1 ケットが混ざった直積状態が重なり合った量子状態(各直積状態の中に含まれる 1 ケットの個数 n は全て共通)に対して、 n を変更しない $U(1)$ 対称性を持つ量子回路を作用させた際の状態のダイナミクスが QS³ のメインターゲットとなる。このような場合の状態空間はオーダーとして量子ビット数 N の n 乗にスケールするため、現代の古典計算機でも原理的に 1000 量子ビット級の計算が可能である。既存の状態ベクトル型量子計算ソフトで採用されている量子ビットの完全系を張る 0/1 ケット状態を 2 進数のビットに対応させる手続きでは、8 バイト整数を活用しても 64 量子ビットの限界があるため、QS³ ではビット表現を使わずに n 固定の直積状態空間と連続する整数を 1 対 1 対応させる関数を定義している。そうすることで、1000 量子ビット級の厳密シミュレーションを実行することに成功した(具体的に実証した内容は[5. 主な研究成果リスト(1). 1]の概要を参照)。QS³ の活用事例として、量子多体系の解析に資する分割統治法の量子・古典ハイブリッドアルゴリズムの有用性を検証するための参照データを提供している[K. Fujii, K. Mizuta, HU, et al, PRX Quantum 3, 010346 (2022)]。

以下、予備的計算のレベルではあるが、すでに適用が成功している事例として、完全強磁性状態に $O(1)$ 個のパウリ X 演算子をランダムに作用させた初期状態に対して $U(1)$ 対称性を保ったランダム量子回路を作用させた際のエンタングルメントエントロピーのスケール解析[上田ら、日本物理学会 2021 年秋季大会]、任意の副格子構造をもつ格子系に対する並進対称性及び点群対称性を陽に考慮した状態管理法と混合スピン系に現れる磁化プラトー解析[上田ら、日本物理学会第 77 回年次大会 (2022)]、粒子数にカットオフを導入する範囲で粒子数非保存系を解析する手続きの構築[上田ら、日本物理学会 2022 年秋季大会]がある。

量子計算ソフトウェアの観点での応用を考察すると、位相反転ノイズ、振幅ダンピングノイズ

は QS^3 の優位性を損なわずに導入できるノイズである。これらのノイズを考慮した $U(1)$ 対称性を保つランダム量子回路計算を 1000 量子ビット級の大規模系で実行することは昨今の NISQ 実機の発展に資する計算として重要であると考えられる。また QS^3 で混合スピン系のシミュレーションが可能であることから、qudit 系の取り扱いや、リーケーリエラーの考慮も適用範囲である。総じて、状態ベクトル型量子ソフトの強みを生かして、希薄粒子系という制約のもと多様な問題設定にアクセスできる環境構築に寄与した。

研究テーマ B 「TN 法の知見を活用した振幅エンコーディング法の開発」

与えられた量子状態を K -qubit (K は任意) のユニタリー演算子からなる量子回路に符号化する量子回路符号化アルゴリズム (AQCE) を提案した。本アルゴリズムでは、符号化された量子回路で表現される量子状態とオリジナルの量子状態間のフィデリティ F の絶対値の最大化を実施している。本最大化はテンソルネットワーク (TN) 法における最適化と同様に、フィデリティ行列¹に対する特異値分解を介して、各ユニタリー演算子を一つずつ順次最適化することにより決定論的に最大化することが可能である。本アルゴリズムのボトルネックは、フィデリティ行列を構築することだが、このタスクに量子計算機の優位性を充てられることを示した。

本研究で提案する AQCE アルゴリズムは、個々のユニタリー演算子が持つ変分パラメータだけでなく、各ユニタリー演算子が作用する回路中の量子ビットの最適な位置も動的に決定するため、与えられた量子状態毎に最適な量子回路を自動的に生成することができる。符号化された量子回路が 2 量子ビットのユニタリー演算子で構成されている場合は、初等量子ゲートは代数的に割り当てられる。そのため、変分量子固有値解法のようなパラメトリックな量子回路を必要とせず、パラメトリック量子回路の勾配などを利用した直接的な最適化が不要な特徴をもつ。

数値シミュレーションにより、典型的な量子多体系としてスピン 1/2 反強磁性 XXZ 模型の基底状態を、2 量子ビットユニタリー演算子からなる量子回路にエンコードするアルゴリズムを実証し、Trotter/MERA-like といった既存の物理の知見に基づいた TN 法にインスパイアされた所定の回路構造と比較しても、AQCE アルゴリズムが生成する量子回路は遜色のないエンコーディング精度を持つことを明らかにした。

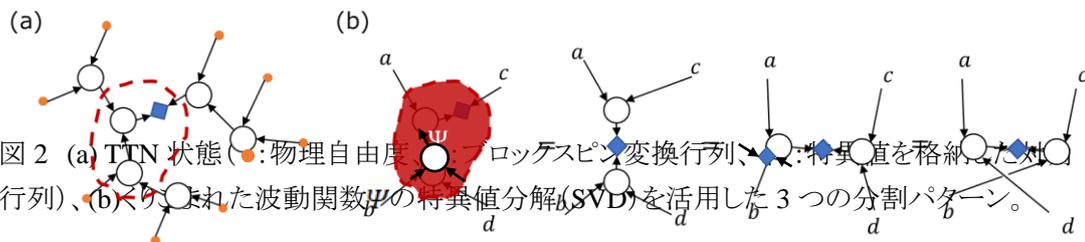
また、AQCE アルゴリズムが、古典画像などの古典データを表す量子状態の符号化に適用できることも実証した。プラクティカルには、大きなピクセル画像をそのままエンコーディングするよりも、分割統治的に大きなサイズの画像から適度に分割された小サイズの画像毎にエンコーディングをかけることが、量子回路表現から逆に画像を再構成したときの品質を大幅に改善することを示した。

さらに、IBM Quantum 社が提供する量子デバイスを用いて、AQCE アルゴリズムで生成した量子回路を実際の量子デバイスに実装し、2 量子ビットや 3 量子ビットといった非常に小規模なセットアップではあるが、所望の量子状態 (シングレット状態、GHZ 状態、ランダム状態) を合理的な精度で生成できることを実験的に実証した。

より、具体的に実証した内容は [5. 主な研究成果リスト(1). 2] を参照。

¹ F を計算するために必要な全 TN において最適化の対象となっている一つのユニタリー演算子に属する自由度を除く全自由度の縮約を取ることによって得られる。

研究テーマ C 「量子状態が持つエンタングルメント構造に適合した TN 構造探索アルゴリズムの開発」



ツリーテンソルネットワーク(TTN)状態[図 2(a)]は物理の粗視化プロセスと対応している TN で、ブロックスピン変換行列(BST)と量子状態をシュミット分解した際に得られる特異値が収められた対角行列(S)で構成される。一度良い TTN が与えられれば、「研究テーマ B」で述べた AQCE を活用して分割統治的に効率よく大規模系の量子回路表現を得ることができるため重要である。本研究で実際に提案したプロセスは、①行列 S に隣接する BST とそれに更に隣接する別の BST に注目した空間で得られる変分空間上でのハミルトニアンの変分最適解 Ψ を得る、②考えられる3つのシュミット分解のパターン[図 3(b)]の中から S を用いて定義されるエンタングルメントエントロピー(EE)が最も低くなる分割パターンを採択する²。この①⇔②を繰り返すことで、TTN は S の位置を変えながらその構造も含め動的かつ逐次的に更新される。計算のデモとして、反強磁性的相互作用の強度分布が空間的に階層構造をもつ非一様な量子ハイゼンベルグ鎖の基底状態に対して本手法を適用すると、予想通り最適なネットワーク構造として完全二分木型の TN を生成することを示し、当該 TN において大きな EE を持つ結合の出現が実際に抑制されていることを明らかにした。より、具体的に実証した内容は[5. 主な研究成果リスト(1). 3]を参照。

発展的な内容としては、実際に全てのサイトペア間に非一様な相互作用があるハイゼンベルグ模型において、既存の TN の知見を活用した tSDRG 法(関-引原-奥西, 2020)よりも良い変分解を与えることが確認できている。

3. 今後の展開

本研究の成果に基づく今後の展開は大きく2つに分けられる:

- ① まず、TN 構造の最適化と AQCE のハイブリッドアルゴリズムの高度化で、従来の TN 法では依然として決定が困難であったランダム量子多体系、時間依存する量子状態シミュレーションに適した TN 構造の探索&量子回路化に挑戦し、古典計算機で得られるベストな波動関数を量子回路化する道筋を整える。
- ② 次に、 QS^3 の適用範囲を離散格子点状の希薄粒子系にマップできる問題群へ拡張でき

² 従来法では与えられた TTN の構造を変えないように一意に分割される。

るように高度化し、飽和磁化近傍の量子スピン系、希薄なボソン／フェルミオン／SU(N) スピン系、粒子数保存則を満たす量子回路系における数値的厳密計算が展開できる状態ベクトル型量子計算ソフトウェアへと高度化開発する。従来の状態ベクトル型量子ソフトでは取り扱い困難な大規模量子系を対象とすることで計算物理学において高インパクトな研究を展開すると同時に、1000-qubit 超級の実機の正常動作を検証するための参照データを提供することで実機開発のマイルストーンを明確化する。本ソフトの開発並びに公開は、計算物理・量子情報のみならず、量子化学、統計物理、数理科学、データ科学などのあらゆる計算科学の中に潜む離散格子点状の希薄粒子系にマップできる問題群の物理を解明するための強力なツールとして基礎科学の研究の加速化に資すると期待される。

4. 自己評価

図 3 に研究計画書に記載した本研究計画の全体概略図および達成状況を示す。図中の青文字は[5. 主な研究成果リスト]と対応しており、また黒字の論文番号は、準主要な研究成果研究成果となっている。本研究期間中に、競合相手が現れるなどして研究の続行を取りやめた内容や、2度のキャリアアップ[理研 R-CCS・研究員→大阪大学量子情報・量子生命研究センター・特任准教授→同センター・准教授]による研究環境の変化などもあったが、適切な研究実施体制並びに研究費執行が維持できたことにより、おおむね当初の目的を達成できた。

研究成果の科学技術・および社会・経済への波及効果という観点では、本研究成果は多様な古典・量子情報を TN 法の知見を活用して現実的なコストで効率良く量子回路化する量子情報処理基盤技術の高度化に資しており、同時に、既存の計算科学に精通している多くの研究者が量子アルゴリズム開発分野に参入する際の障壁を低くすることに貢献する。ひいては量子人材の増加を促し、量子技術を起点とした社会変革の創出に寄与する土台形成に繋がる。

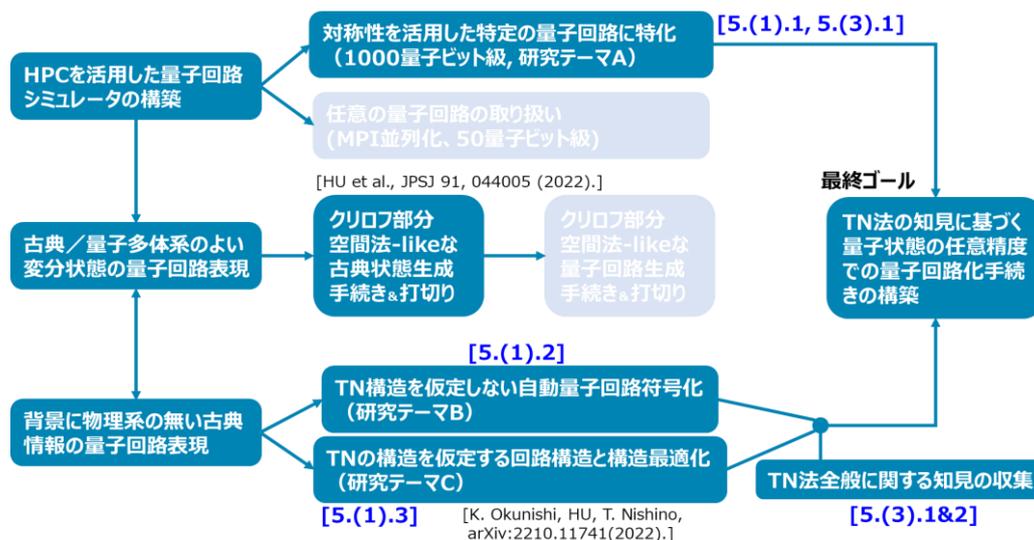


図 3 研究計画全体概略図と達成状況

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:13件

1. H. Ueda, S. Yunoki, T. Shimokawa, “Quantum spin solver near saturation: QS3”, *Computer Physics Communications* 277, 108369 (2022) [12 pages].

本研究では、原理的に省計算資源でも 100 サイト超系の数値的厳密計算が実行可能な問題例として、空間的に一様/非一様な格子上的スピン 1/2 XXZ 型量子スピン模型の完全分極状態近傍の固有状態の解析に特化した非従来型の状態ベクトル型量子計算ソフトウェアを開発した。当該ソフトウェアでは、固有値問題に加えて、得られた固有状態における 1 点/2 点スピン演算子の期待値、静的/動的スピン構造因子を計算することができる。具体的なベンチマークとして、 $10 \times 10 \times 10$ 立方格子上的ハイゼンベルグ模型の低エネルギー励起分散、 10×10 正方格子上的同模型の静的・動的スピン構造因子に関して、openMP による高い並列化効率をもって計算を実施することに成功した。

2. T. Shirakawa, H. Ueda, S. Yunoki, “Automatic quantum circuit encoding of a given arbitrary quantum state”, arXiv:2112.14524 (2021) [25 pages], under review in *Physical Review Research*.

物性物理分野で洗練化されたテンソルネットワーク(TN)状態の最適化手法を転用して、任意の量子状態を有限個の 2 量子ビットに作用する量子ゲートからなる量子回路上に符号化する量子古典ハイブリッドアルゴリズムを開発した。当該アルゴリズムのノイズのない数値シミュレーションデモとして、幾つかの 1 次元量子スピン鎖の基底状態の符号化を行い、既存の TN に触発された量子回路構造の結果と比較して遜色ない符号化精度を持つ量子回路構造を自動生成することに成功した。さらに、当該アルゴリズムを振幅符号化によって量子状態表現される古典画像データに対しても適用し、分割統治的な処方箋も含めてコンパクトな量子回路上に状態を符号化できることを示した。また、ノイズが有るシミュレーションとして、当該アルゴリズムによって生成された量子回路を量子実機に入力し、真の量子状態の再現度を確認した。

3. T. Hikihara, H. Ueda, K. Okunishi, K. Harada, T. Nishino, “Automatic structural optimization of tree tensor networks”, *Physical Review Research* 5, 013031 (2023) [11 pages].

ツリーテンソルネットワーク(TTN)は、量子回路表現との対応が容易に考察可能な TN で、且つ量子多体系を効率よく表現するよく知られた変分状態であり、その近似精度向上には TTN を構成するアイソメトリと呼ばれるテンソルの接続性によって定義される TN 構造が重要な役割を果たす。本論文では、アイソメトリの局所的且つ動的な再接続によって、TTN のボンド上で定義可能な二分割エンタングルメントエントロピーの低減を実現する「最適な TTN」を探索するアルゴリズムを提案している。実際、反強磁性的相互作用の強度分布が空間的に階層構造をもつ非一様な量子ハイゼンベルグ鎖の基底状態に適用した結果、状態に内在するエンタングルメント構造を反映して、完全二分木型の最適な TTN を自動的に得ることに成功した。

(2) 特許出願

なし

(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)

[量子計算ソフトウェア:1件]

1. H. Ueda, T. Shimokawa, “QS³ for ED”, <https://github.com/QS-Cube/ED>.

[招待レビュー論文/記事:2件]

2. K. Okunishi, T. Nishino, H. Ueda, “Developments in the Tensor Network — from Statistical Mechanics to Quantum Entanglement”, *Journal of the Physical Society of Japan* **91**, 062001 (2022) [34 Pages].

3. 上田宏、「テンソルネットワークと数値計算—省計算資源による大規模計算から超並列計算技術まで」、*数理科学*, **60**(2), 58-64 (2022).

[招待講演:2件]

4. 上田宏、「量子計算機に適合したテンソルネットワーク法」、物性研究所短期研究会「量子多体計算と第一原理計算の新展開」、2020年7月9日、オンライン。

5. 上田宏、「量子多体計算×量子情報処理から眺める量子マテリアルズインフォマティクス」、兵庫県立大学大学院物質理学研究科「マテリアルズインフォマティクス研究会」2021年3月22日、オンライン。