

テンソルネットワーク×量子計算機による量子物性シミュレータ —少数 Qubit で探る ∞ 自由度の海に潜む特徴的状态—

1. 背景

本プロジェクトで対象とする「量子物性」とは、私たちの身の回りに現れる多彩な「物性」の背後には量子力学の基礎方程式である「シュレーディンガー方程式」が存在し、それにより統一的に物性が理解あるいは設計されることを示している。近年の計算機の発達を受け、物理現象の解明に計算機を用いる「計算物理学」の発展は目覚ましく、実験・理論物理学に比肩する第三の柱となっている。シュレーディンガー方程式からダイレクトに物性を予測する「量子物性シミュレータ」の構築は計算物理学の中心的課題であり、産学の分野で常に需要のあるソフトウェアとして位置付けられている。

しかしながら、現存する計算機の延長線上で万能な量子シミュレータを構築することは難しい。例えば、磁性(物質の磁氣的性質)をその構成要素である電子スピンから考える場合、その量子状態の記述には電子数に対して指数関数的に増大する次元の複素ベクトルが必要となり、必要なメモリ量はすぐに莫大となる。そのため、スーパーコンピュータ「京」をフルに利用したとしても、わずか 48 スピンのシミュレーションが限界となっている[1]。一方、量子計算機にはその基本単位の「Qubit」を電子数だけ用意すれば、その量子状態を表現できるという優位性が存在する。そのため一見すると完全な量子計算機があれば容易に万能な量子物性シミュレータが開発できるような気がするが、アボガドロ数($\sim 6 \times 10^{23}$)オーダーの多数の電子や原子が集まって織りなす物理系を表現するためには同等数の Qubit が必要となることから、量子計算機を用いても直接的にそれらを取り扱う戦略は非自明である。同様の困難さ量子化学系計算でも現れる。なぜなら扱う電子数が数 10、数 100 オーダーであったとしても非常に複雑な相互作用が存在し、全ての電子の量子状態が非自明に絡み合うためである。

以上の問題を、古典計算機を活用して解決する枠組みとして「テンソルネットワーク法」というアプローチが存在する[2]。その計算原理は応用数理の分野で議論される「テンソル分解」の数理的構造と量子情報分野における「エンタングルメント」の概念に立脚しており、これらの知見が特定の分野にとらわれない汎用的なものであることを受けて、現在では素粒子物理／物性物理／量子化学／統計物理／数理科学／量子情報分野などの分野にまたがって盛んに議論が進められている。特に量子物性の記述手段としては、量子多体系における波動関数のコンパクトな表現として「テンソルネットワーク状態」が今日注目されている。

2. 目的

本プロジェクトでは、テンソルネットワーク状態の最適化問題やダイナミクスを、ゲート式量子計算機 IBM Q システム(以下、「実機」とする)による量子操作・観測手続きを利用してシミュレートできる環境を開発することを目的とする。特に本プロジェクトで利用可能な実機と既存の古典計算機との併用環境上で現実的に動作可能なアルゴリズムの構築に焦点をあて、現存の実機の規模を超える演算に関しては古典計算機上のシミュレータを利用して本プロジェクトで提案するアルゴリズムのパフォーマンスを検証する。これらを通じて、近い将

来著しい発展が期待される量子計算機と成熟を迎えた古典計算機が織りなすポストムーア時代に向けた大規模量子シミュレータ構築のための基盤技術を提供し、産学の実展へ貢献する。また、将来の量子計算機利用者拡大のために本プロジェクトの成果として得られたシミュレータはオープンソース化し、広く配布できる環境を整える。

3. ソフトウェア開発内容

(1) 分散メモリ型並列計算による量子回路シミュレータの高速化

量子計算機の優位性を利用した量子アルゴリズムを効率的に開発するためには古典計算機上で量子回路の性能を評価する量子回路シミュレータの高速化が不可欠となる。本プロジェクトでは任意の 2-qubit 演算の積で表現されるテンソルネットワーク状態の評価に特化した量子回路シミュレータの開発を行った。開発したソフトウェアの仕様を以下に示す。

実装言語: Fortran90

並列環境: MPI 規格に準拠した分散メモリ型並列計算 + OpenMP のハイブリッド並列

コンパイラ: 富士通/Intel 系 Fortran コンパイラ (mpifrtpx / mpiifort)

ライブラリ: スレッド並列版 BLAS

機能: 任意の 2-qubit ゲート群を指定した 2 Qubits & 内部変数に作用させた後、さらに指定した Qubit 間のスピン相関関数を測定する [図 1]。

補足: 各 MPI プロセス内のゲート演算に関しては、Qulacs における 2-qubit ゲート演算の OpenMP 並列実装 [3] を参照した。また、プロセス間に分散して記憶される状態ベクトルのアドレス管理に関しては先行研究 [1] を参照した。逐次版に関しては既存の量子回路シミュレータである Qiskit ならびに Qulacs を用いて同様のものを Python で実装し、本プログラムが正しく動作していることを検証した。

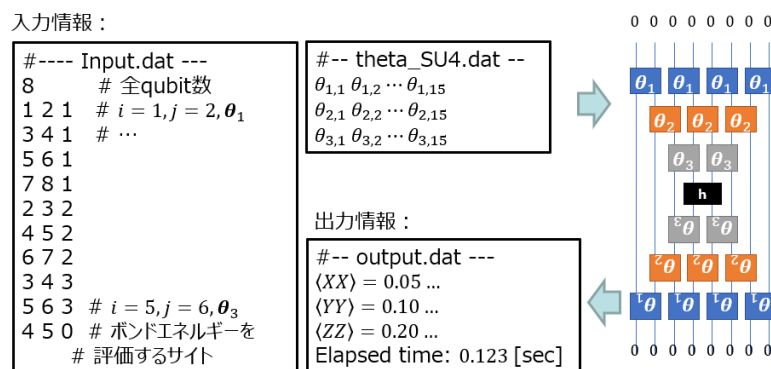


図 1: 開発したプログラムの入出力情報

(2) テンソルネットワーク法の知見を利用した無限系量子スピン系の有限 Qubit 解析

無限個数の量子スピンで記述されるハミルトニアン基底状態エネルギーを有限個数の Qubit によって変分的に推定する手続きを構築した。その際キーとなったのはテンソルネットワーク法の知見、すなわち「物理系がもつ空間的並進対称性を考慮した量子回路 (MPU 回路) の導入」および「量子ゲートのユニタリ性から決定される因果円錐の考察から導かれ

る最小回路の構成」である。具体的な計算の対象には、厳密解が知られている一次元反強磁性的量子ハイゼンベルグ模型を選んだ。いくつかの種類の MPU 回路を用いて系統的に解析することで、変分エネルギーを約 99.8%の精度で推定することに成功した。推定精度は MPU 回路の深さにおおむね逆比例することが分かり、またハイゼンベルグ模型が持っているスピン空間の回転対称性を回路に反映させると、変数の数を約 1/15 にしつつ同等の精度で推定が行えることを示した[図 2]。

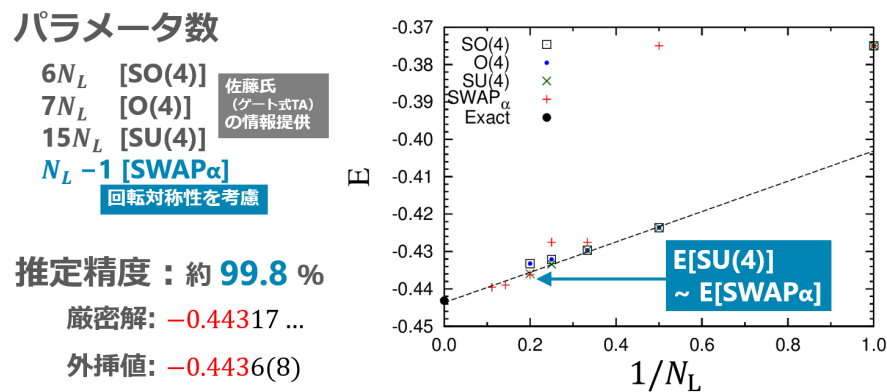


図 2: 一次元反強磁性的量子ハイゼンベルグ模型の基底状態エネルギー推定

(3) 電子系における基底状態および低エネルギー励起の高精度推定プログラム

Adapt VQE [4] と SSVQE [5] と呼ばれる二つの VQE (Variational Quantum Eigensolver) アルゴリズムのハイブリッド計算を行った。Python で実装したプログラムを利用して 2×2 サイト Hubbard 模型と Be 原子 (4 軌道) の計算を行った結果、いずれも化学精度を超える精度で基底/第一励起状態エネルギーを推定できることが分かった[図 3]。本ハイブリッドアルゴリズムは基とした Adapt/SS-VQE アルゴリズムと同様に、軌道の数に対して多項式オーダーでスケールするため、今後目標とする大規模電子系の高精度計算に適用可能な手法として重要と考えられる。



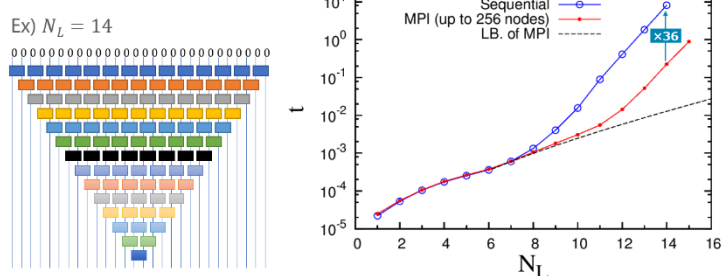
図 3: Hubbard 模型と Be 原子系における数値計算結果

4. 新規性・優位性

本プロジェクトで開発した並列化量子回路シミュレータの性能を理研のスーパーコンピュータ「HOKUSAI GreatWave」において評価した結果、既存の実装の中でも最高速を誇る Qulacs と比較して 28 qubits の系で最大で 36 倍も高速であることから、シミュレーション速度の面での優位

性を持つことが確認された[図 4]。また MPU 回路を用いて無限系一次元量子スピン系の基底状態エネルギーが系統的に改善できる様子を明らかにした。さらに、Adapt VQE+SSVQE のハイブリッドアルゴリズムによって少数多体系の電子系の高精度計算を検証した。

1次元行列積ユニタリ回路



28 qubit系で 256 ノード並列で約 36 倍速を達成

図 4: MPU 回路の模式図とベンチマーク計算結果

5. 期待されるユーザー価値と社会へのインパクト

現代の基礎科学の発展のために量子物性現象の数値的解析は必要不可欠となっており、新規物性現象創出の基盤技術として日本の基礎科学分野の国際競争力の向上のために必要な要素となっている。本プロジェクトによって開発された分散メモリ計算機における並列化量子物性シミュレータはスーパーコンピュータをはじめとする High performance computing 分野の人材による量子アルゴリズム開発の加速化が可能であることを明確に示している。また本プロジェクトで実証した量子状態の最適化はすべて VQE に属しており、近い将来に期待されている古典計算機と量子計算機の協奏時代において物性物理・量子化学分野に現れる量子多体系の研究を加速する基盤技術を提供する。

6. 氏名(所属)

上田 宏 (理化学研究所 計算科学研究センター)

大塚 雄一(理化学研究所 計算科学研究センター)

中田 真秀(理化学研究所 情報システム本部)

(参考)関連 URL

[1]D. Raedt, et al., Phys. Commun. **237**, 47 (2019).

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2018.11.005>

[2]R. Orús, Nat. Rev. Phys. **1**, 538 (2019).

DOI: <https://doi.org/10.1038/s42254-019-0086-7>

[3]Qulacs における 2-qubit ゲート演算(double_qubit_dense_matrix_gate_parallel), https://github.com/qulacs/qulacs/blob/master/src/csim/update_ops_matrix_dense_double.c#L41

[4]H. R. Grimsley, et al., Nat. Commun. **10**, 3007 (2019).

DOI: <https://doi.org/10.1038/s41467-019-10988-2>

[5] K. M Nakanishi, K. Mitarai, K. Fujii, Phys. Rev. Research 1, 033062 (2019).

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.1.033062>

[6] 中田 (本プロジェクトメンバ) の量子計算アルゴリズムに関連する講演スライド:

https://www.slideshare.net/NakataMaho?utm_campaign=profiletracking&utm_medium=sssite&utm_source=ssslideview