

実施項目8: 量子・HPC連携アプリケーションの研究開発と有効性の検証

物性物理学、量子化学、素粒子・原子核物理学などを中心とした量子多体系に対する量子アルゴリズムを開発し、本事業で構築された量子・スパコン連携プラットフォームを用いて古典計算可能限界を超えた量子計算を少なくとも1つのアプリケーションで実現する。

量子・HPC連携アプリケーション

- (1)量子ダイナミックス
- (2)量子熱力学計算
- (3)量子変分法に基づく量子最適化問題
- (4)量子変分法を超えた量子最適化問題
- (5)量子埋め込み法に基づく量子状態計算
- (6)量子選択配置相互作用法による低エネルギー状態計算

量子・HPC連携アプリケーション

- (1)量子ダイナミックス
- (2)量子熱力学計算
- (3)量子変分法に基づく量子最適化問題
- (4)量子変分法を超えた量子最適化問題
- (5)量子埋め込み法に基づく量子状態計算
- (6)量子選択配置相互作用法による低エネルギー状態計算

←先ほどの講演で詳しく報告

研究開発成果【事業項目⑧】

研究開発目標に対する
達成状況

【量子・HPC連携アプリケーションの研究開発と有効性の検証】

研究開発状況：予定通りに進行中

【量子ダイナミクス】

- IBM Heron processor 133量子ビット全てを用いた、縦横磁場イジング模型に対する量子ダイナミクス実験を実施し、その結果を、2次元テンソルネットワーク状態(2dTNS)法による富岳を用いた古典計算と比較することで、古典計算が難しいパラメータを決定した [事業項目⑥、⑦と共同, arXiv:2403.16718 ('24)]

【量子熱力学計算】

- 縦横磁場イジング模型に対する量子ダイナミクスを活用することで、ミクロカノニカル熱力学計算を行う量子アルゴリズムを提案し、Quantinuum量子コンピュータを用いてその有効性を確認した [Phys. Rev. Research 7, 023032 ('25), プレスリリース: https://www.riken.jp/press/2025/20250411_1/index.html]

【量子変分法に基づく量子最適化問題】

- 1次元スピニレスフェルミオンSu-Schrieffer-Heeger模型の基底状態計算を例として、断熱近似に基づく量子変分法を提案し、その有効性を Quantinuum 量子コンピュータを用いて検討した [arXiv:2504.07499 ('25)]

【量子埋め込み法に基づく量子状態計算】

- 量子埋め込み法の一つである動的平均場近似法に基づく電子状態計算のための量子アルゴリズムを開発中。今年度中に、Quantinuum量子コンピュータを用いて、NiOに対する電子状態計算を実施予定

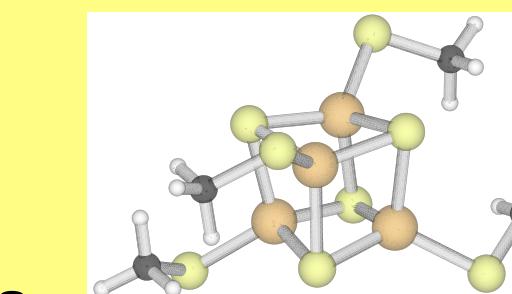
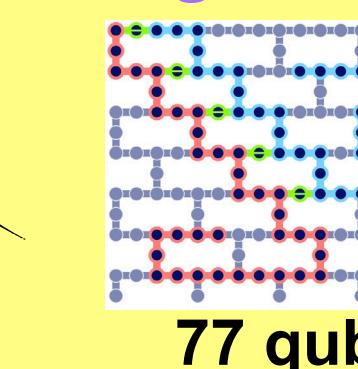
【量子変分法を超えた量子最適化問題】

- 虚時間ダイナミクスによって基底状態を確率的に計算する量子アルゴリズムをQuantinuum社量子コンピュータに実装し、その有効性を検討した [arXiv:2504.04958 ('25)]
- 強相関電子状態を記述するGutzwiller波動関数を量子コンピュータに実装する方法を提案し、IBM及びQuantinuum量子コンピュータを用いてその有効性を議論した [arXiv:2504.18149 ('25)]

【量子選択配置間相互作用(QSCI)法による低エネルギー状態計算】

- QSCI法に基づくsample-based quantum diagonalization (SQD)法を提案し、IBM量子コンピュータと富岳を連携した量子化学計算を実施した。77量子ビットを用いたFe₄S₄に対する基底状態計算など、これまでの量子化学計算の規模をはるかに超えた計算を実現 [Sci. Ad. 11, eadu9911 ('25), プレスリリース: https://www.riken.jp/press/2025/20250619_1/index.html]

Fe₄S₄: Pushing hardware capabilities



【deliverables】

FY2025 : SQD法で用いる部分空間対角化法コードの公開
FY2028 : 量子優位性を示すアプリケーションの実現

Outcomes 【事業項目⑧】

【原著論文（投稿中含む）】

1. K. Shinjo, K. Seki, T. Shirakawa, R.-Y. Sun, S. Yunoki, "Unveiling clean two-dimensional discrete time quasicrystals on a digital quantum computer", arXiv:2403.16718 (2024). [事業項目⑥、⑦と共同]
2. K. Seki, Y. Kikuchi, T. Hayata, S. Yunoki, "Simulating Floquet scrambling circuits on trapped-ion quantum computers", Phys. Rev. Research **7**, 023032 (2025). [プレスリリース: https://www.riken.jp/press/2025/20250619_1/index.html, 理研research highlight: https://www.riken.jp/en/news_pubs/research_news/rr/20250822_2/index.html]
3. J. Robledo-Moreno, M. Motta, H. Haas, A. Javadi-Abhari, P. Jurcevic, W. Kirby, S. Martiel, K. Sharma, S. Sharma, T. Shirakawa, I. Sitdikov, R.-Y. Sun, K. J. Sung, M. Takita, M. C. Tran, S. Yunoki, A. Mezzacapo, "Chemistry beyond the scale of exact diagonalization on a quantum-centric supercomputer", Science Advances **11**, eadu9991 (2025). [プレスリリース: https://www.riken.jp/press/2025/20250619_1/index.html]
4. S. Ejima, K. Seki, B. Fauseweh, S. Yunoki, "Probabilistic imaginary-time evolution in state-vector-based and shot-based simulations and on quantum devices", arXiv:2504.04958 (2025).
5. Q. Xie, K. Seki, T. Shirakawa, S. Yunoki, "Digital quantum simulation of the Su-Schrieffer-Heeger model using a parametrized quantum circuit", arXiv:2504.07499 (2025).
6. H. Xu, K. Seki, S. Yunoki, "Preparing the Gutzwiller wave function for attractive SU(3) fermions on a quantum computer", arXiv:2504.19149 (2025).
7. K. Nagao, D. Yamamoto, S. Yunoki, I. Danshita, "Melting of a bosonic Mott insulator in Kagome optical lattices with sign-inverted hopping", arXiv:2504.19407 (2025).
8. K. Nogaki, S. Backes, T. Shirakawa, S. Yunoki, R. Arita, "Symmetry-adapted sample-based quantum diagonalization: Application to lattice model", arXiv:2505.00914 (2025).
9. L. Broers, R.-Y. Sun, S. Yunoki, "Scalable simulation of quantum many-body dynamics with or-represented quantum algebra", arXiv:2506.13241 (2025).
10. K. Nagao, S. Julia-Farre, J. Vovrosh, A. Dauphin, S. Yunoki, "Pulse-based optimization of quantum many-body states with Rydberg atoms in optical tweezer arrays", arXiv:2507.19153 (2025).

Outcomes 【事業項目⑧】

【知財（出願手続き中も含む）】

- なし

【対外発表】

- S. Yunoki, "Quantum many-body simulations using digital quantum computers", SQAI-NCTS Workshop on Quantum Technologies and Machine Learning, Taipei, Taiwan, August 25-29 (2025) [Invited]. [事業項目⑥、⑦と共同]
- T. Shirakawa, "Quantum-HPC hybrid simulation for quantum chemistry", SQAI-NCTS Workshop on Quantum Technologies and Machine Learning, Taipei, Taiwan, August 25-29 (2025) [Invited].
- T. Shirakawa, "Pushing the frontier of quantum-centric supercomputing for electronic structure calculations", Materials Science Working Group In-Person Workshop 2025, Kobe, Japan, August 18-20 (2025).
- L. Broers, "Scalable Simulation of Quantum Many-Body Dynamics with Or-Represented Quantum Algebra", Materials Science Working Group In-Person Workshop 2025, Kobe, Japan, August 18-20 (2025).
- N. Vaquero Sabater, "A Fully Classical Approach to Subspace Quantum Diagonalization: A Case Study on Fe₂S₂", Materials Science Working Group In-Person Workshop 2025, Kobe, Japan, August 18-20 (2025).
- 白川知功、"量子HPC連携システムによる量子化学計算", SQAI サマーキャンプ2025 サステイナブル量子AI研究拠点 研究開発課題2・3 合同夏合宿、群馬、2025年8月6日-8日.
- 白川知功、"量子多体問題のための量子HPCハイブリッド計算", Tensor Network 2025, Tokyo, Japan, July 16-18 (2025) [Invited].
- 柚木清司, "物性物理学における量子コンピュータ応用", 大阪大学 固体物理セミナー, 大阪, 2025年7月16日. [事業項目⑥、⑦と共同]
- S. Yunoki, "Pushing the frontier of quantum-centric supercomputing for electronic structure calculations", RIKEN Fugaku – IBM System Two 連携稼働記念式典「富岳と量子で開拓する計算可能領域シンポジウム」, Kobe, Hyogo, June 24 (2025). [事業項目⑦と共同]
- S. Yunoki, "Quantum many-body simulations using digital quantum computers", Joint International Workshop on Quantum Computing, Tainan, Taiwan, June 23-25 (2025) [Invited]. [事業項目⑧と共同]
- S. Yunoki, "Quantum many-body simulations using trapped-ion digital quantum computers", The 2nd Workshop on Quantum Computation meets Quantum Many-body Computation, Shanghai, China, June 17-20 (2025) [Invited]. [事業項目⑦と共同]
- S. Yunoki, "Pushing the frontier of quantum-centric supercomputing for electronic structure calculations", IBM Quantum Partner Forum 2025, London, UK, June 6/4-6 (2025). [事業項目⑦と共同]

Outcomes 【事業項目⑧】

【対外発表（つづき）】

13. S. Yunoki, "Quantum many-body simulations using Quantinuum H1 & H2 systems", Quantinuum May 2025 training session, Osaka, May 19-20 (2025) [Invited]. [事業項目⑦と共同]
14. 柚木清司, "Utility scale 量子計算で探る量子多体系の基底状態と量子ダイナミクス", 第2回QIIシンポジウム, 東京, 2025年5月16日. [事業項目⑥、⑦と共同]
15. N. Lindner, S. Yunoki, "Quantum-enhanced HPC simulations with error mitigation", Q2B Tokyo, Tokyo, May 15-16 (2025).
16. S. Yunoki, "Utility scale quantum computing: From qualitative to quantitative computing", Workshop on Quantum Computing Towards Utility Era with Quantum + HPC, Tokyo, March 10 (2025) [Invited]. [事業項目⑦と共同]
17. 柚木清司, "Utility scale 量子コンピューティング –定性的計算から定量的計算へ–", 2024年度量子・スパコン連携プラットフォームプロジェクトシンポジウム, 東京, 2025年2月12日 [Invited]. [事業項目⑧と共同]
18. 関和弘, "イオントラップ型量子コンピュータを用いたフロケスクランブリング量子回路のシミュレーション", SQAI 量子シミュレーション研究会, 東京, 2025年1月21日
19. N. Lindner, S. Yunoki, "Pushing forward for quantum advantage with error mitigation and HPC", Q2B Silicon Valley, Santa Clara, USA, December 10-12 (2024). [事業項目⑦と共同]
20. S. Yunoki, "Quantum computational science for quantum many-body systems in condensed matter physics", High Energy Physics in the Quantum Era, Tsukuba, December 2-4 (2024) [Invited]. [事業項目⑥、⑦と共同]
21. S. Yunoki, "RIKEN Quantum: Advancing quantum computational science for scientific research applications", RIKEN-BNL Workshop on Fundamental Quantum Science, Wako, October 4 (2024). [事業項目⑥、⑦と共同]
22. S. Yunoki, "Quantum many-body simulations in digital quantum computers", Recent Progress in Many-Body Theories (RPMBT22), Tsukuba, September 23-27 (2024) [Invited]. [事業項目⑥、⑦と共同]
23. S. Yunoki, "Quantum many-body dynamics in digital quantum computers", RIKEN-LBNL Workshop on Quantum Information Science, Berkley, September 3-6 (2024) [Invited]. [事業項目⑥、⑦と共同]
24. 柚木清司, "量子コンピュータを用いた量子ダイナミクスシミュレーション", 第3回学術変革領域「学習物理」物性関係討論会, 東京, 2024年7月31日-8月1日 [Invited]. [事業項目⑥、⑦と共同]
25. N. Lindner, S. Yunoki, "Pushing forward for quantum advantage with error mitigation and HPC", Q2B Tokyo, Tokyo, July 24-25 (2024). [事業項目⑦と共同]
26. S. Yunoki, "Quantum many-body dynamics in digital quantum computers", 第26回極限宇宙オンラインコロキウム, 2024年7月10日 [Invited]. [事業項目⑥、⑦と共同]
27. S. Yunoki, "Recent advances in utility research: Unveiling clean two-dimensional discrete time quasicrystals on a digital quantum computer", IBM Quantum Partner Forum 2024, Milan, Italy, May 13-15 (2024). [事業項目⑥、⑦と共同]