

JHPC-quantumシンポジウム2025

テンソルネットワークを用いた 量子化学計算の大規模実機実行

菅野 志優

三菱ケミカル株式会社

2025年12月12日

量子コンピューターの現状

- 古典コンピューターを超えるポテンシャル
応用例：量子化学計算による分子設計
- 大規模化への過渡期

現在のスペック

量子ビット：10-1000

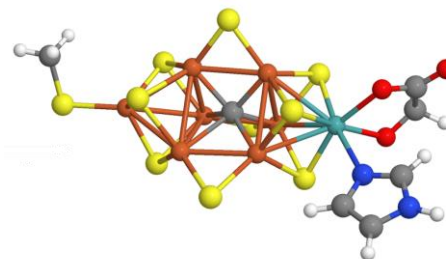
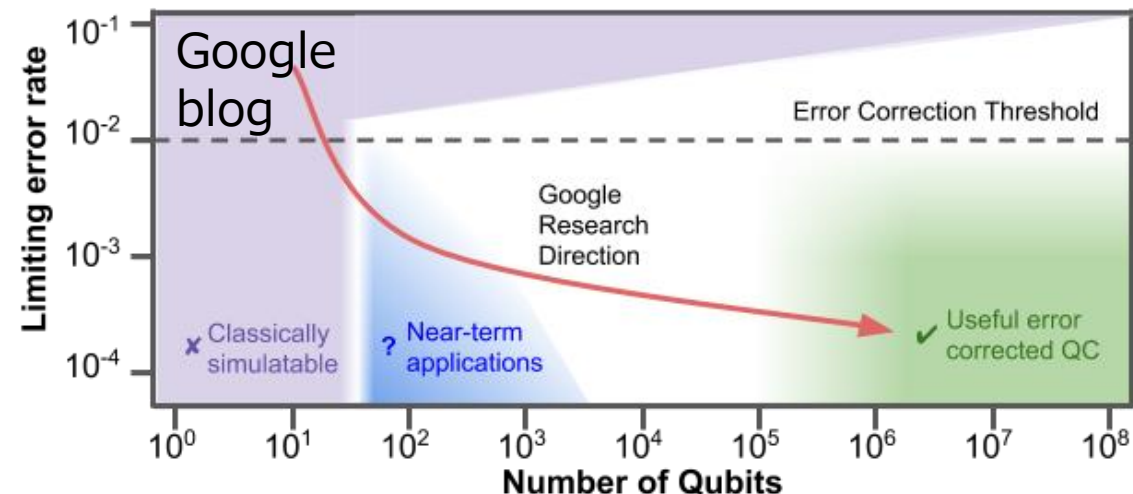
50量子ビットくらいで優位性

2量子ビットゲート：1,000-10,000

化学応用における課題

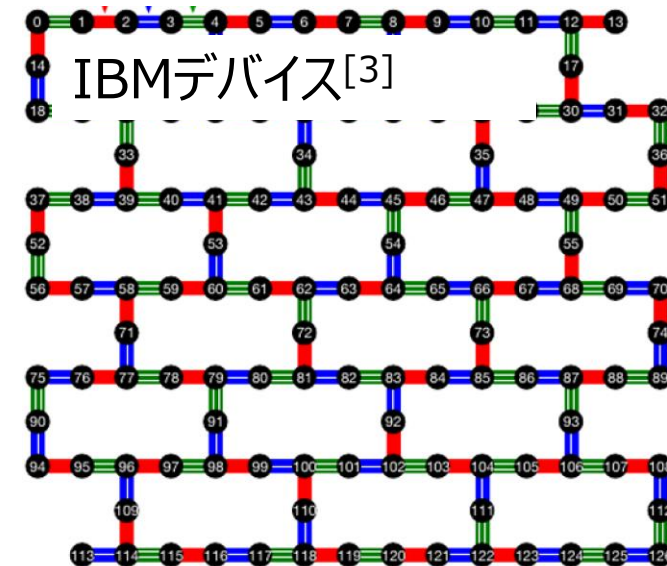
物理ノイズ

量子ビット間の接続



アンモニア合成触媒
のエネルギー計算

3億ゲート必要^[1,2]

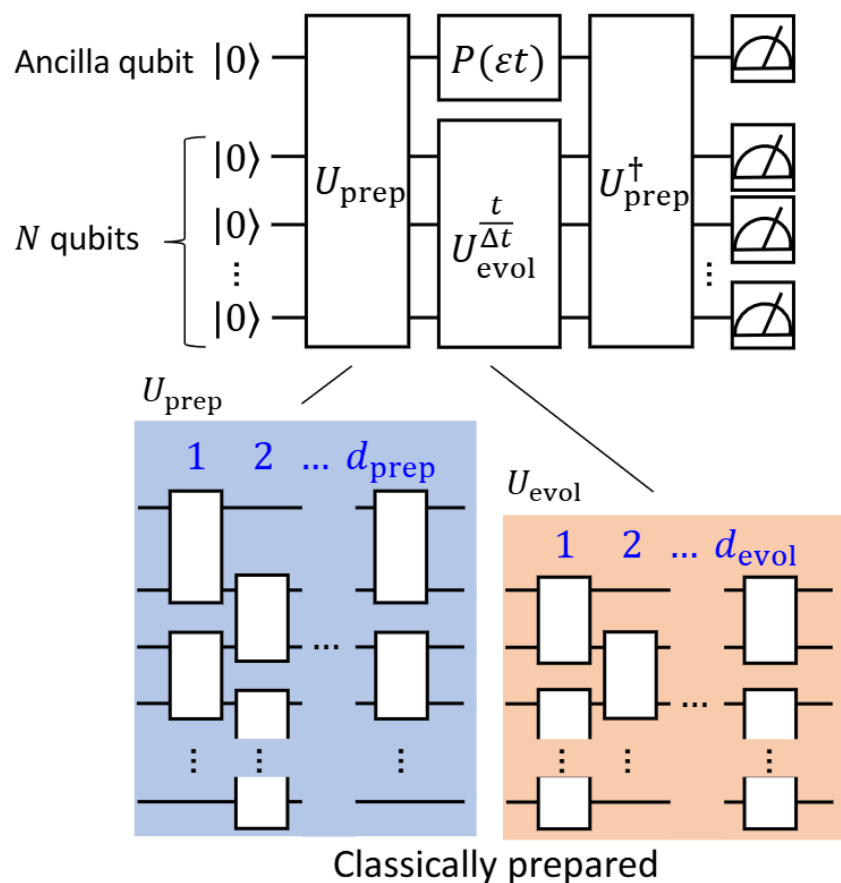


プロジェクトの概要

【これまでの研究】位相推定タイプのエネルギーギャップ計算アルゴリズム

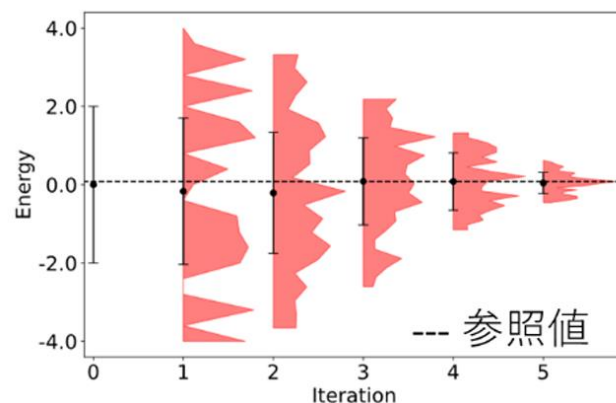
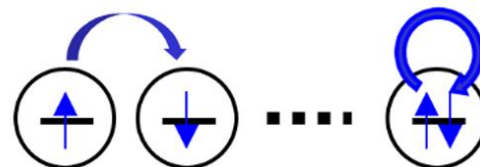
実機実行：最大32量子ビットの1次元ハバードモデル & 20量子ビットのポリエン

本プロジェクトではスパコン連携によりこのアルゴリズムの**大規模化**を検討する

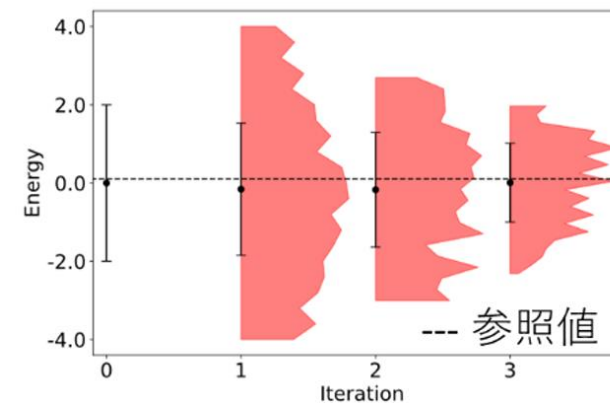
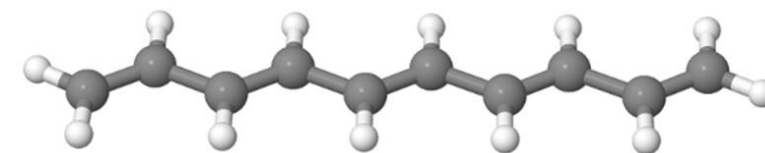


(a) ハバードモデル

運動項 t クーロン項 U

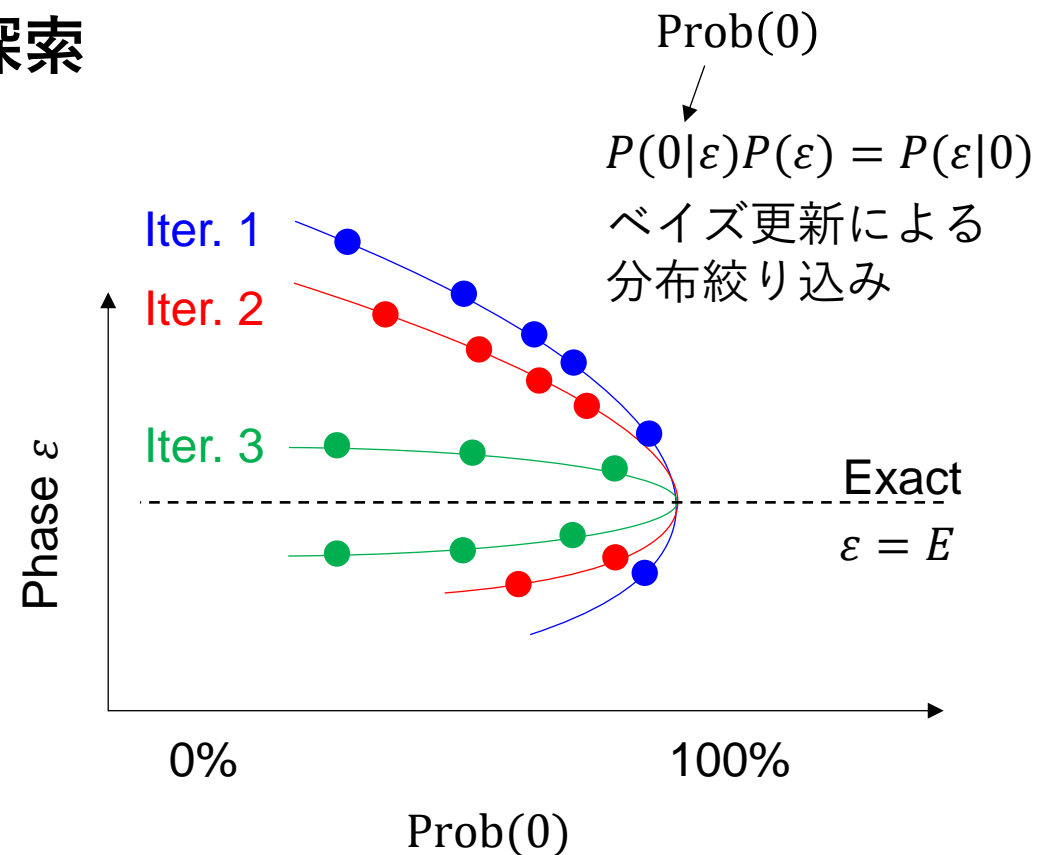
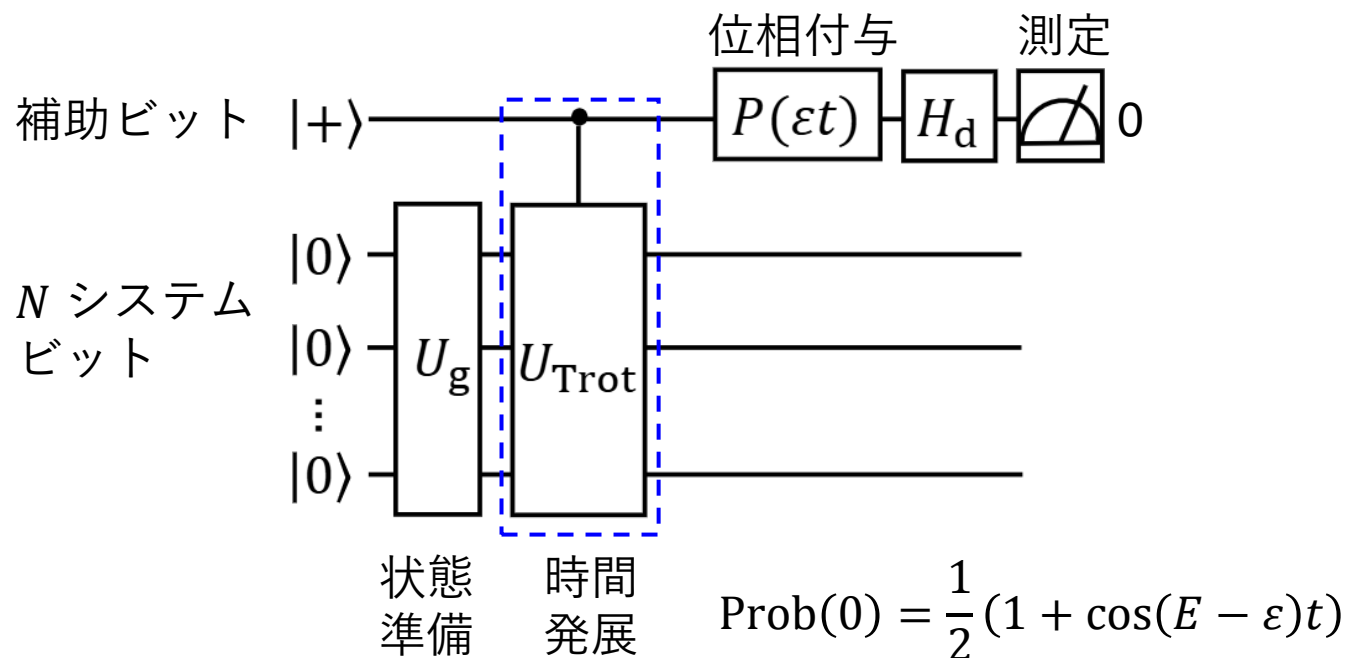


(b) 直鎖分子（デカペンタエン）



化学計算向けベイズ型量子位相推定 [1, 2]

基底状態などの、エネルギーに対応する位相 ε を探索



課題

制御付き時間発展のコスト

多くの研究では2ビットシステム、最大6ビット [3]

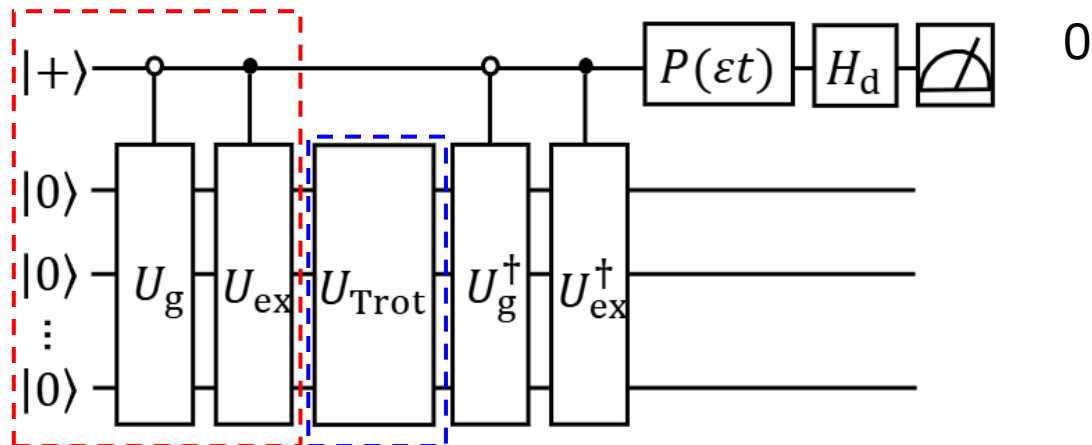
[1] N. Wiebe, *et al.* Phys. Rev. Lett. **117**, 010503 (2016).

[2] K. Sugisaki, *et al.* Phys. Chem. Chem. Phys. **23**, 20152 (2021).

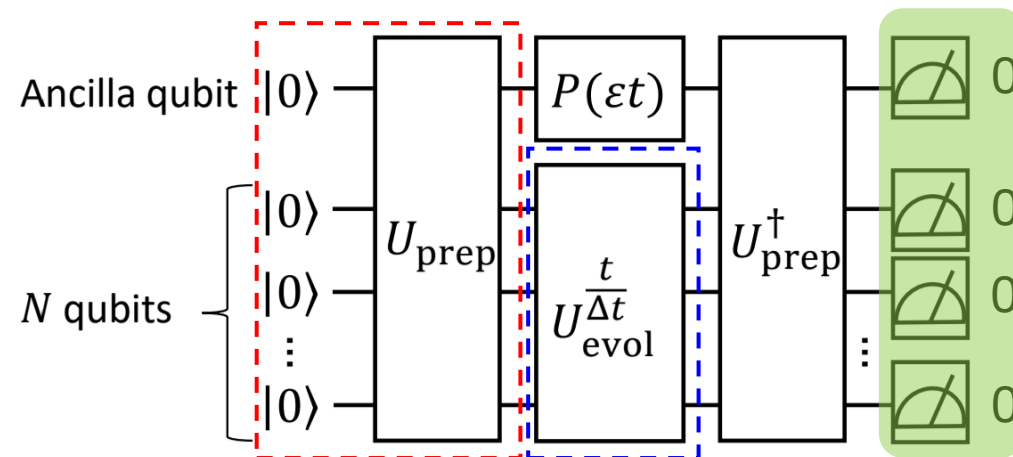
[3] N. S. Blunt, *et al.* PRX Quantum **4**, 040341 (2023).

提案手法の特徴

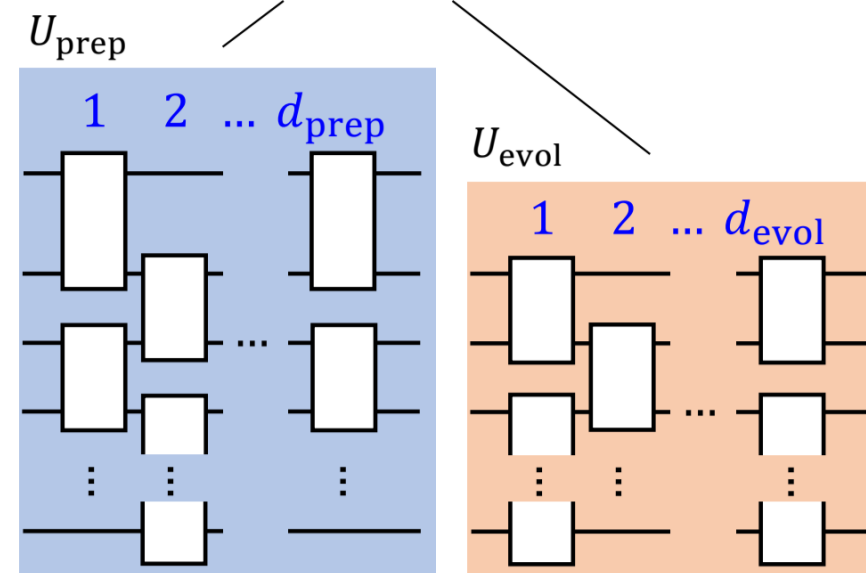
量子位相差推定^[1]



提案手法



- 量子位相差推定の採用
 - エネルギーギャップ計算にフォーカス
 - 制御付き時間発展の除去
- 高性能計算（HPC）によるテンソルを用いた古典回路圧縮
 - 超伝導デバイスで扱いやすい隣接ゲート構造に圧縮・変換
 - 全ビット0測定によるノイズ混入の指数低減

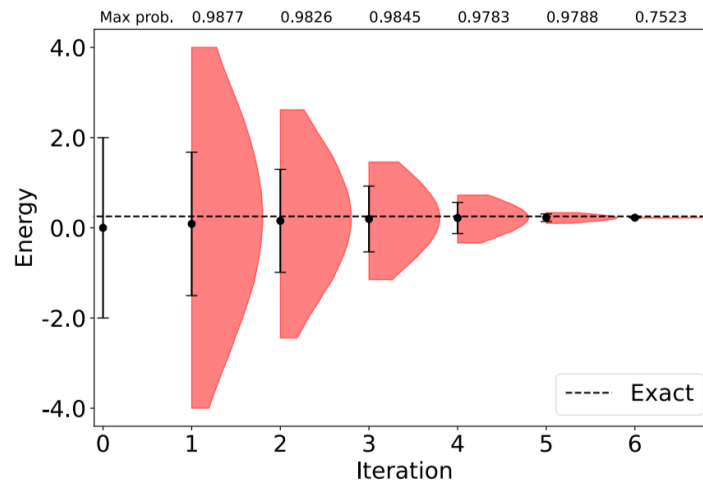


HPCで計算

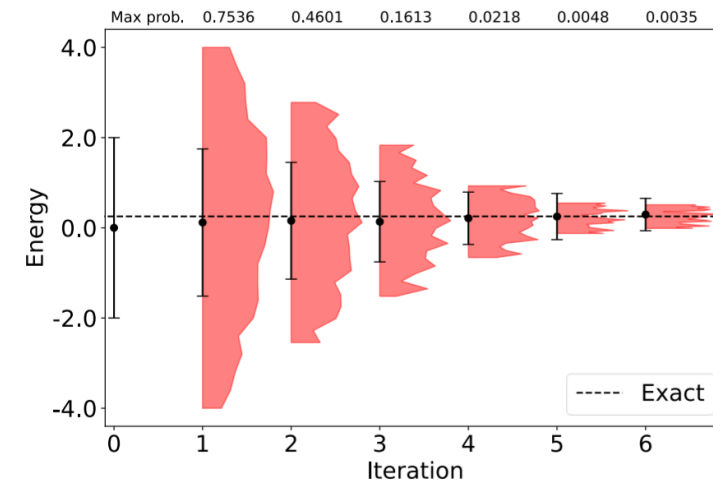
Hubbardモデルの実行

- IBM HeronデバイスをQ-CTRLエラー抑制モジュールを通して実行^[1]
- 32システムビットまで実行
誤差は約40ミリHartree
- 先行研究^[2]の
5倍以上のサイズ

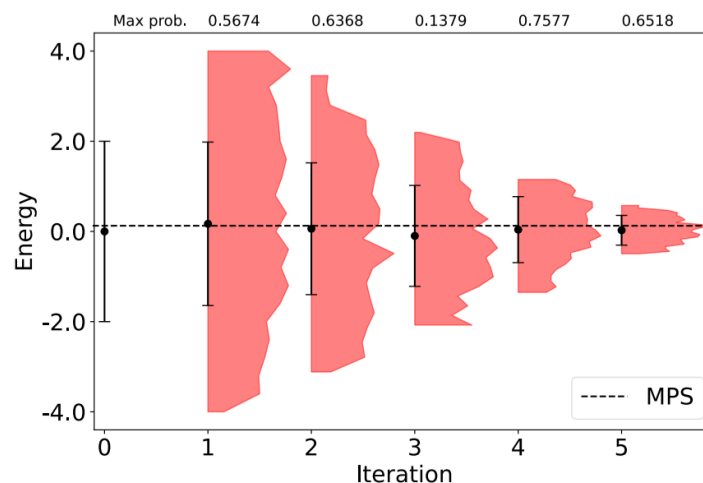
(a) Noiseless simulator, 9 qubits



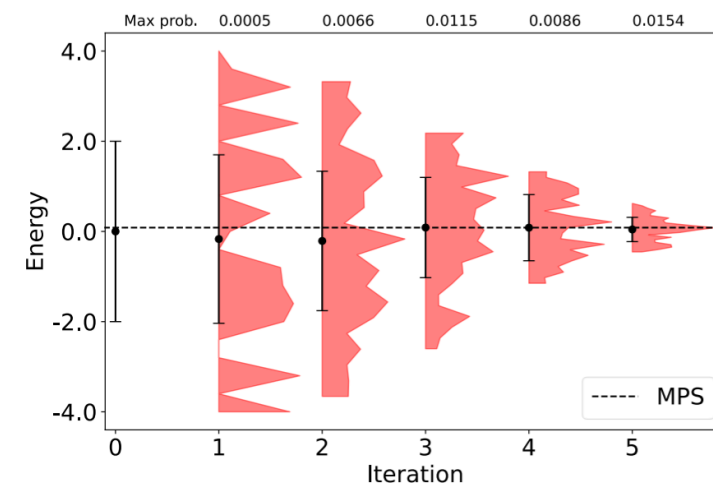
(b) Real device, 9 qubits



(c) Real device, 21 qubits



(d) Real device, 33 qubits



大規模化成功の要因

回路の単純化

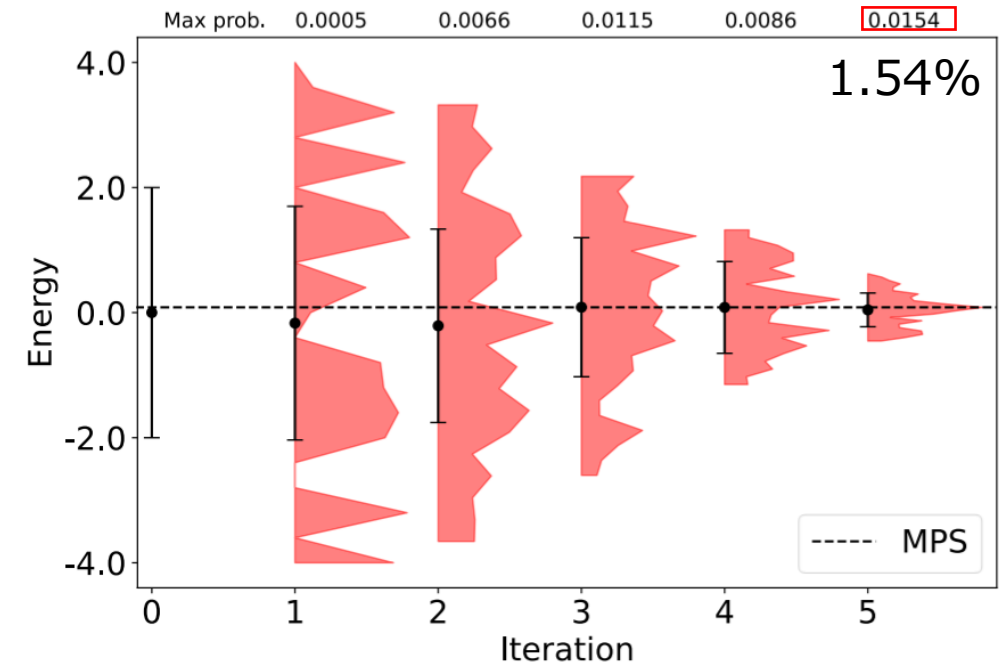
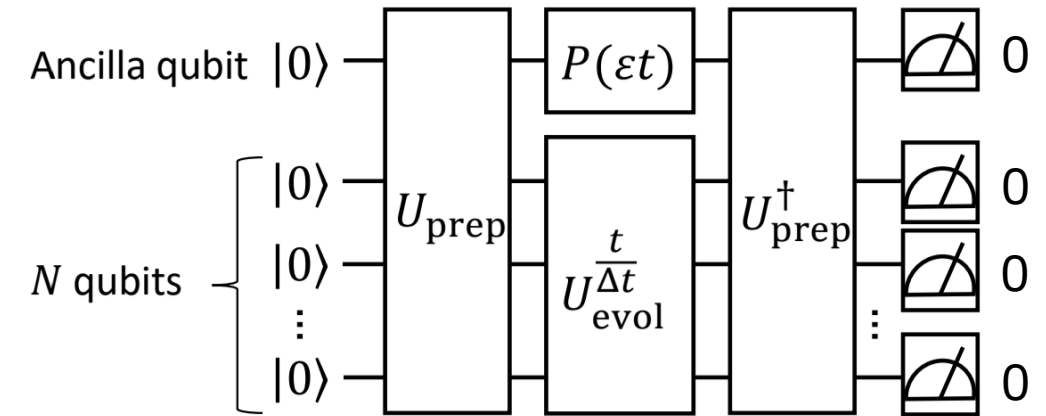
- 位相「差」推定による時間発展の制御除去
- HPCによるテンソル回路圧縮
- AIエラー抑制モジュール (Q-CTRL)
33量子ビットでは2量子ビットゲート数が
7242→794

エラー頑強性

- ビット数に対しノイズ混入が指数減衰

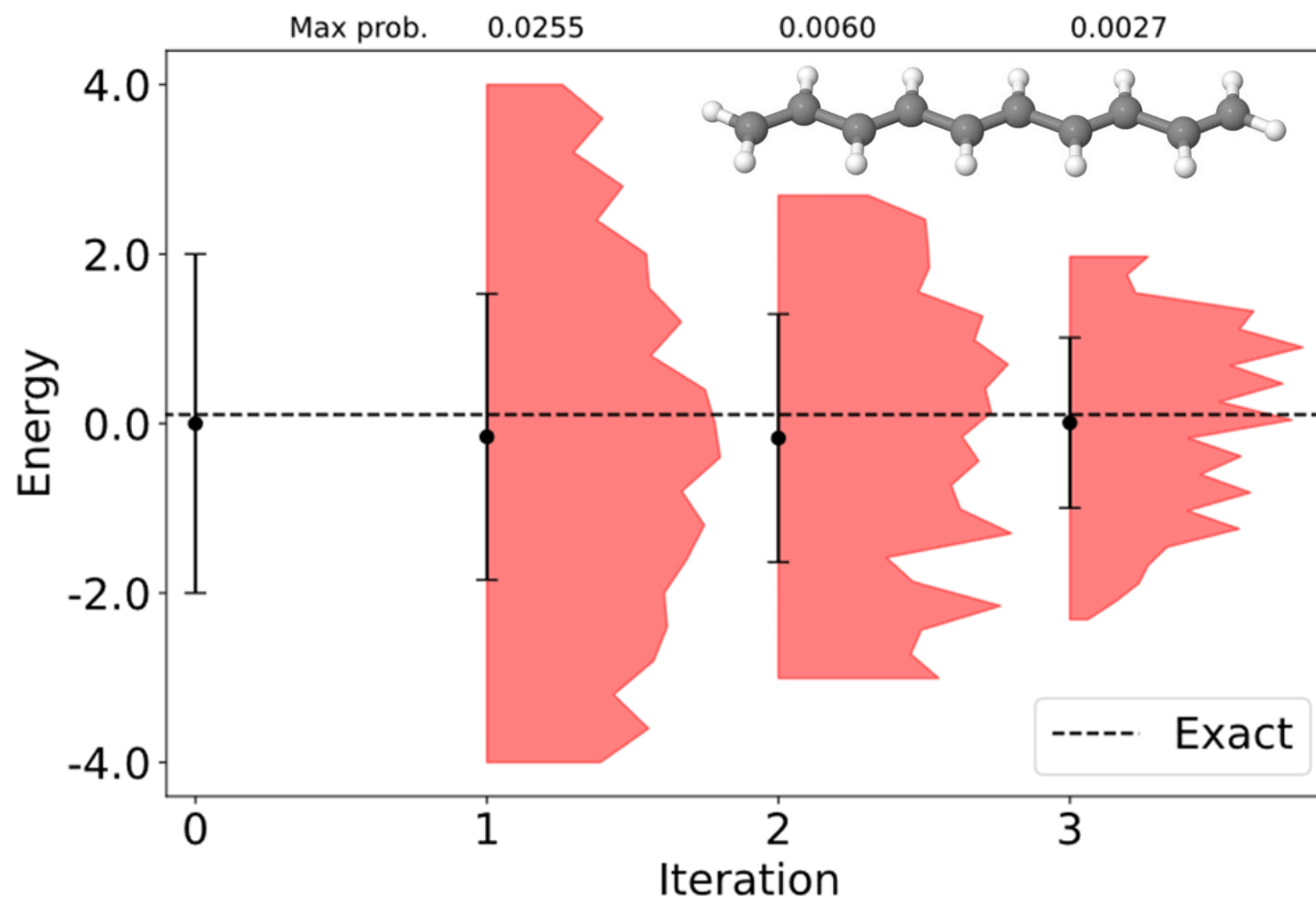
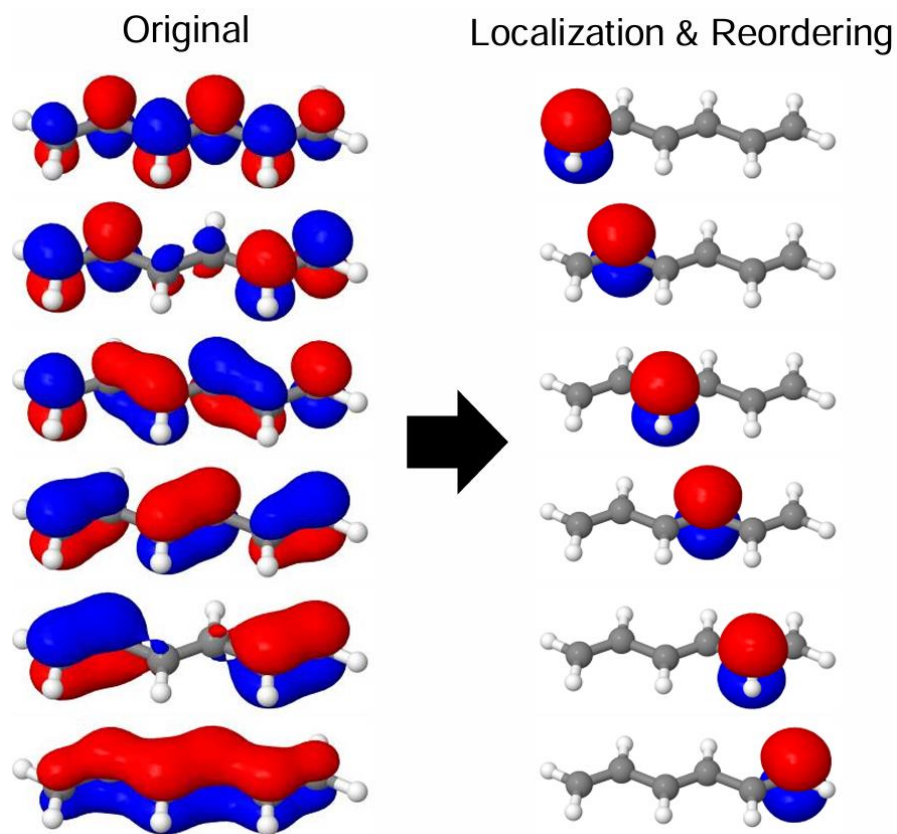
$$\text{Prob(all 0)} = \underbrace{\frac{1 - p_{\text{dep}}}{2}}_{\text{全0測定確率}} \underbrace{\left(1 + \cos(E_{\text{gap}} - \varepsilon)t\right)}_{\text{シグナル項}} + \underbrace{\frac{p_{\text{dep}}}{2^{N+1}}}_{\text{ノイズ項}}$$

- 実機検証では、シグナル1.5%でもピーク残存



ポリエンの実行（21量子ビット）

分子軌道は非局在→軌道回転+並び替えで1次元に変換
量子計算の精度向上 & 古典処理軽減



本プロジェクトの目標

これまでの研究^[1]

テンソルに基づいた位相推定型のギャップ計算アルゴリズム

- 32量子ビットのハバードモデル、20量子ビットのポリエンで実機デモ
→従来（6量子ビット）の5倍以上の規模

目標

化学モデルを対象に、さらに大きな分子で位相推定したい

方針

- 最適化する回路をより深くして精度を上げる。富岳 or GPU上での並列化を想定
- 前処理、後処理の工夫