

# 量子物理と情報科学のあいだ

東京大学 大学院工学系研究科物理工学専攻  
吉岡 信行

2024.07.04



# 自己紹介



- ・2015年 東京大学 理学部物理学科 卒業
- ・2016年 スイス連邦工科大学 チューリッヒ校 留学
- ・2020年 東京大学 理学系研究科物理学専攻 博士課程修了
- ・2020.4-12 理化学研究所 特別研究員
- ・2021.01 - 東京大学 工学系研究科物理工学専攻 助教
- ・2021.10 - JSTさきがけ研究者



## 研究を通じて知りたいこと・やりたいこと

科学者の夢：自然界の森羅万象を理解したい

量子物理学者の夢：量子力学が生む森羅万象を理解したい

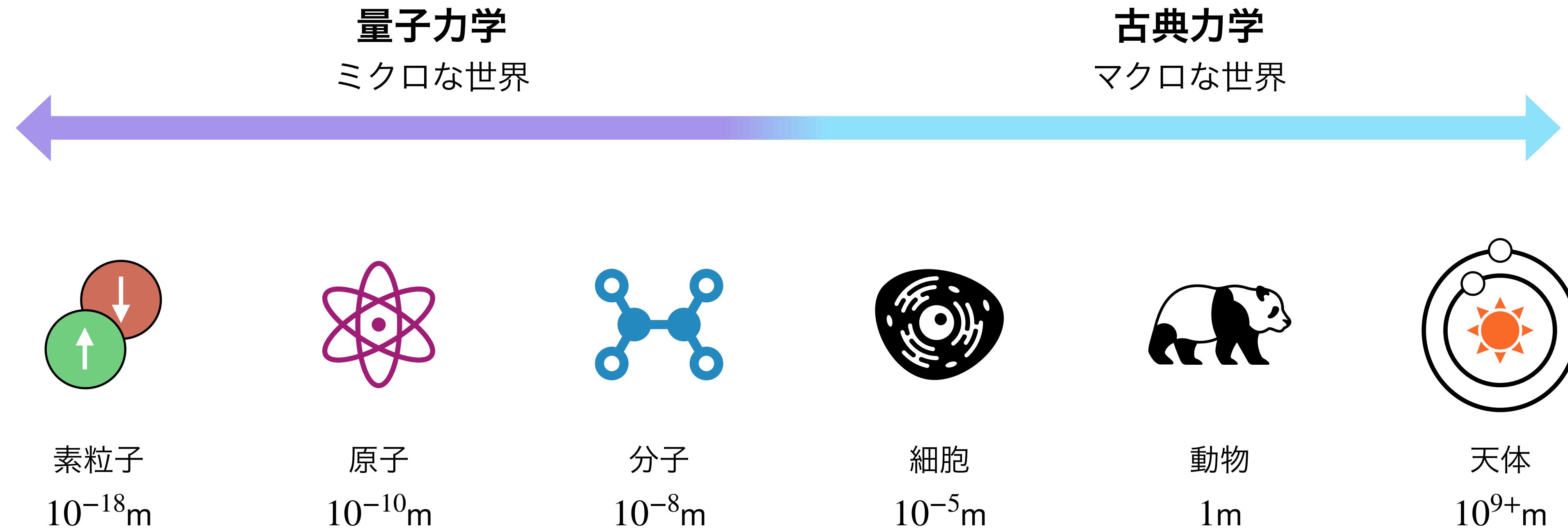
**私の夢：量子力学が生む森羅万象を理解し、情報処理・制御したい**  
(理学と工学の架け橋)

# あらすじ

---

- ・量子力学・量子物理学とは
- ・量子物理と情報科学
- ・量子物理と量子計算

# 量子力学とは



古典力学 = 細胞・生物・惑星・宇宙レベルの高エネルギー運動を記述

マクロな世界や常温・高温領域の挙動を支配

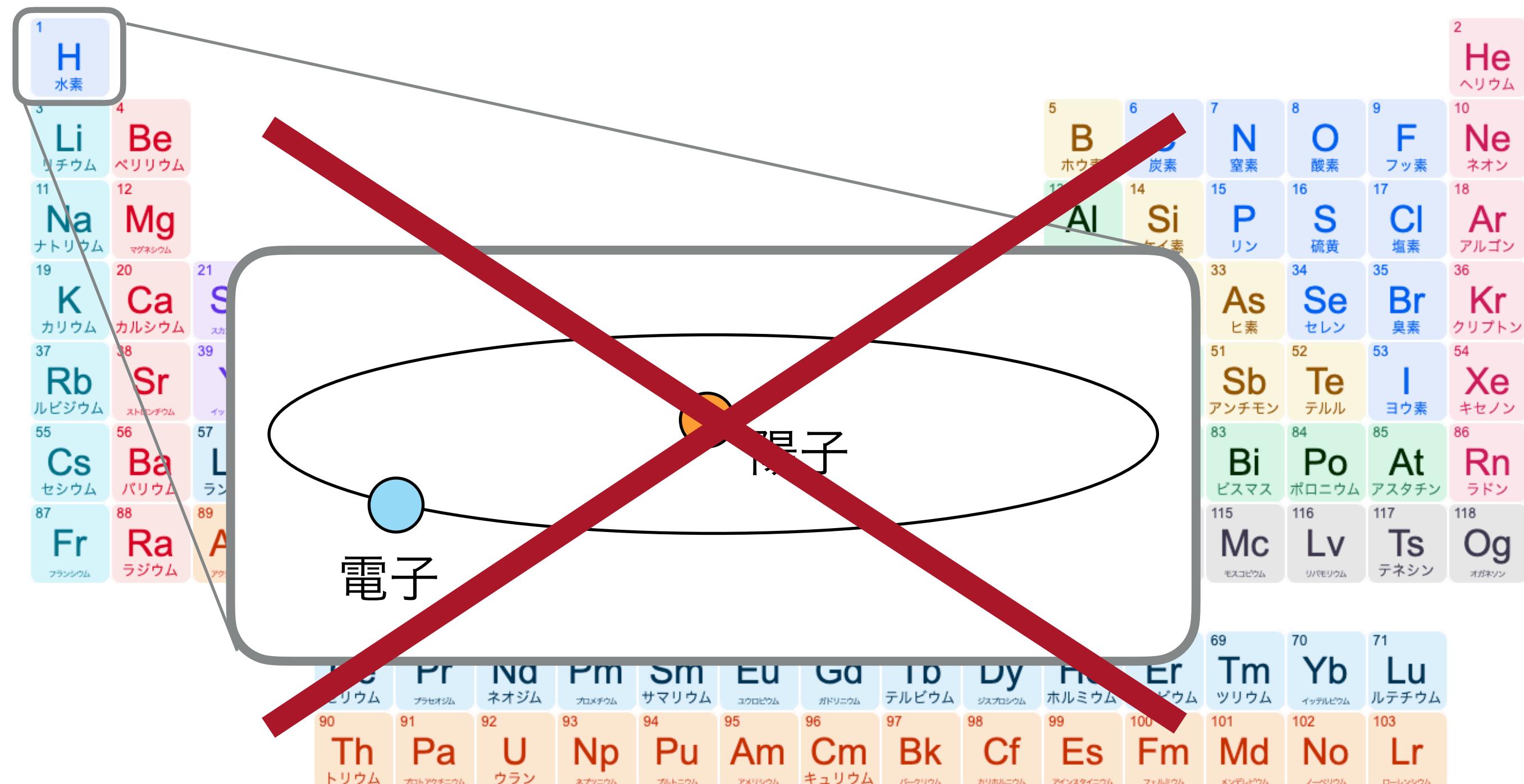
量子力学 = 分子・原子・素粒子レベルの運動を記述

ミクロな世界や低温領域の挙動を支配

# 量子力学とは

量子力学を必要とする問い合わせの例：原子はどんな形をしているか？

水素原子 = 陽子x1 + 電子x1



○ アルカリ金属

○ 半金属

○ アクチノイド

○ アルカリ土類金属

○ 反応性非金属

○ 不明

○ 遷移金属

○ 貴ガス

○ ポスト遷移金属

○ ランタノイド

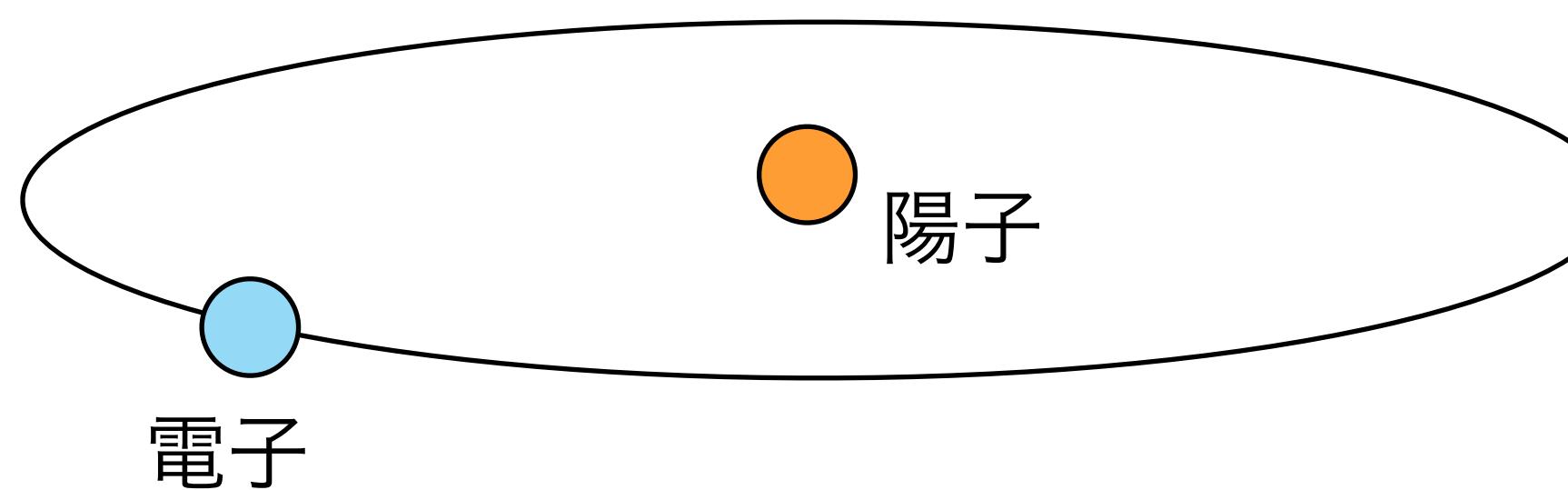
# 量子力学とは

量子力学を必要とする問い合わせの例：原子はどんな形をしているか？

古典：原子核の周りを周期運動すると思われていた

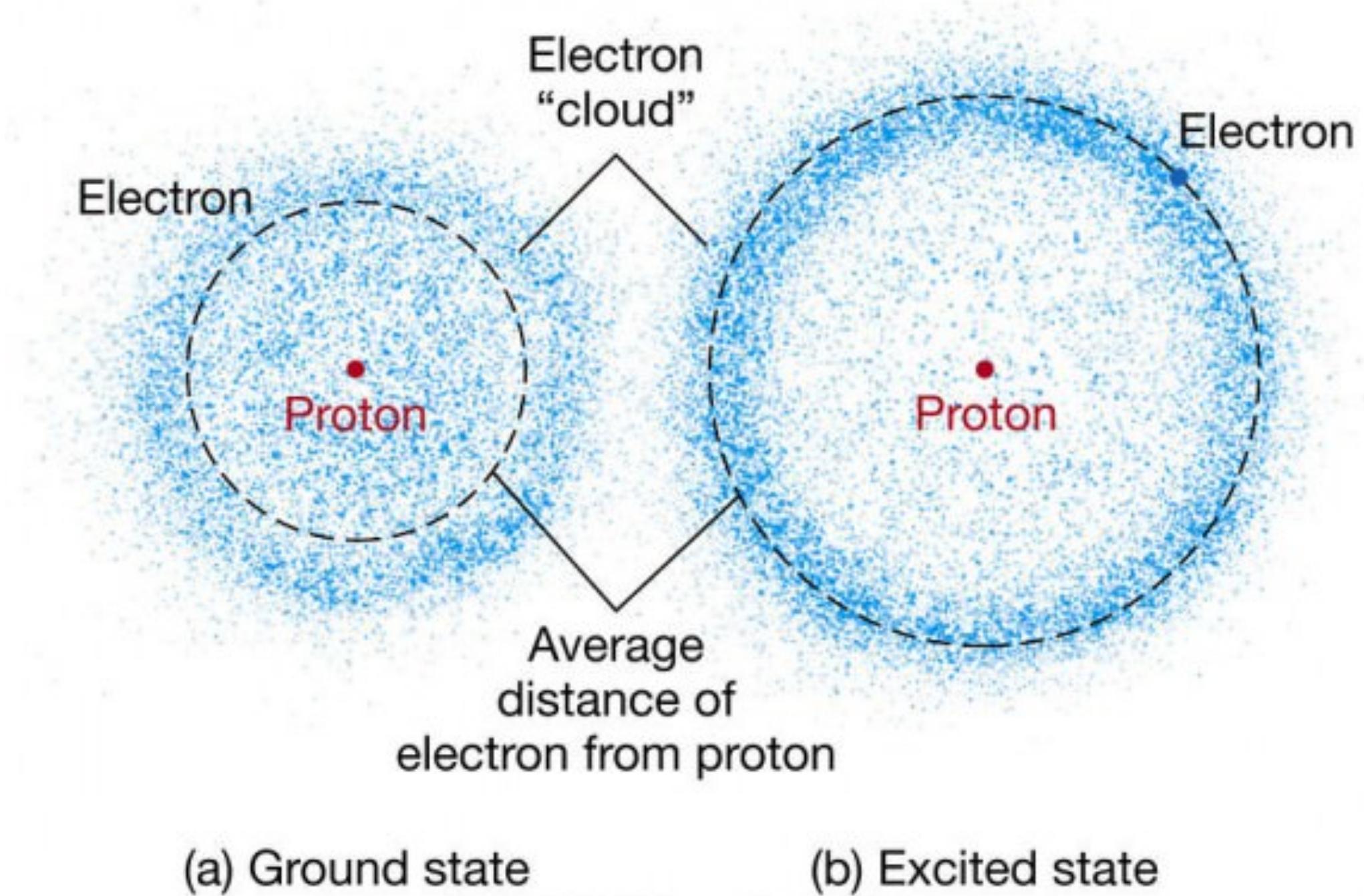
→ 原子が安定に存在できない

(電子による電磁放射)



量子：雲のように「確率的」に存在

位置の重ね合わせ



Copyright © 2005 Pearson Prentice Hall, Inc.

# 物質における量子力学

量子力学を必要とする問い合わせの例：物質を冷やすとどんな状態になるか？

1	H 水素	2	He ヘリウム
3	Li リチウム	4	Be ベリリウム
11	Na ナトリウム	12	Mg マグネシウム
19	K カリウム	20	Ca カルシウム
37	Rb ルビジウム	38	Sr ストロンチウム
55	Cs セシウム	56	Ba バリウム
87	Fr フランジウム	88	Ra ラジウム
89	Ac アクチノイド		
22	Ti チタン	23	V バナジウム
40	Zr ジルコニウム	41	Nb ニオブ
72	Hf ハフニウム	73	Ta タンタル
104	Rf ラザホージウム	105	Db ドブニウム
58	Ce セリウム	59	Pr プラセオジム
90	Th トリウム	91	Pa プロトアクチニウム
60	Nd ネオジム	61	Pm プロメチウム
92	U ウラン	93	Np ネプチニウム
62	Sm サマリウム	63	Eu ヨウロピウム
94	Pu プロトニウム	95	Am アメリシウム
64	Gd ガドリニウム	65	Tb テルビウム
96	Cm キュリウム	97	Bk バーカクルム
66	Dy ジスプロシウム	98	Cf カリボリニウム
98	Ho ホルミウム	99	Es アインスタインium
67	Tb エルビウム	100	Fm フェルミウム
68	Dy ツリウム	101	Md メンデレビウム
69	Er イリジウム	102	No ノーベリウム
70	Tm ローレンツィウム	103	Lr ローランツィウム
71	Lu ルテチウム		

○ アルカリ金属

○ アルカリ土類金属

○ 遷移金属

○ ポスト遷移金属

○ 半金属

○ 反応性非金属

○ 貴ガス

○ ランタノイド

○ アクチノイド

○ 不明

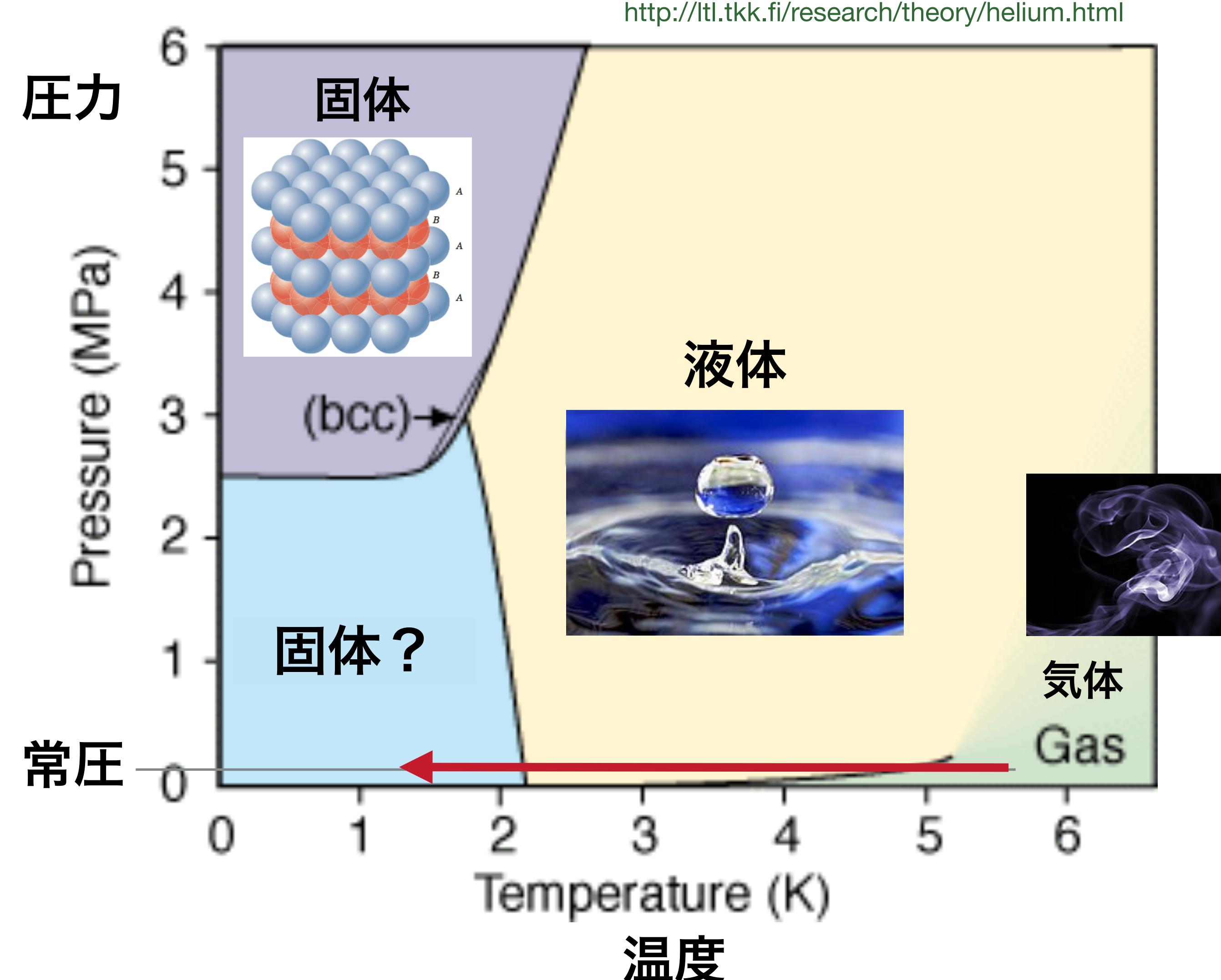


# 物質における量子力学

量子力学を必要とする問い合わせの例：物質を冷やすとどんな状態になるか？

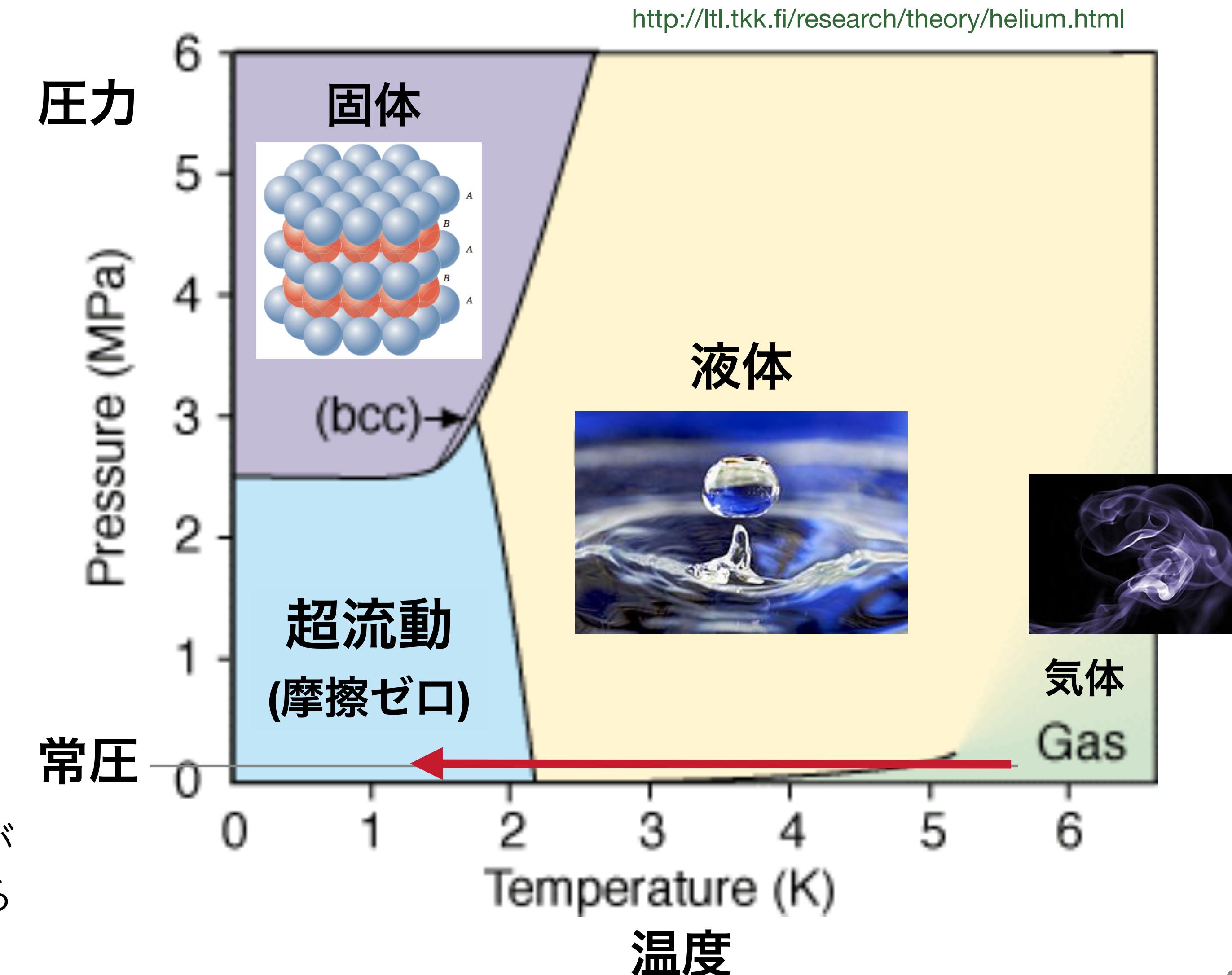
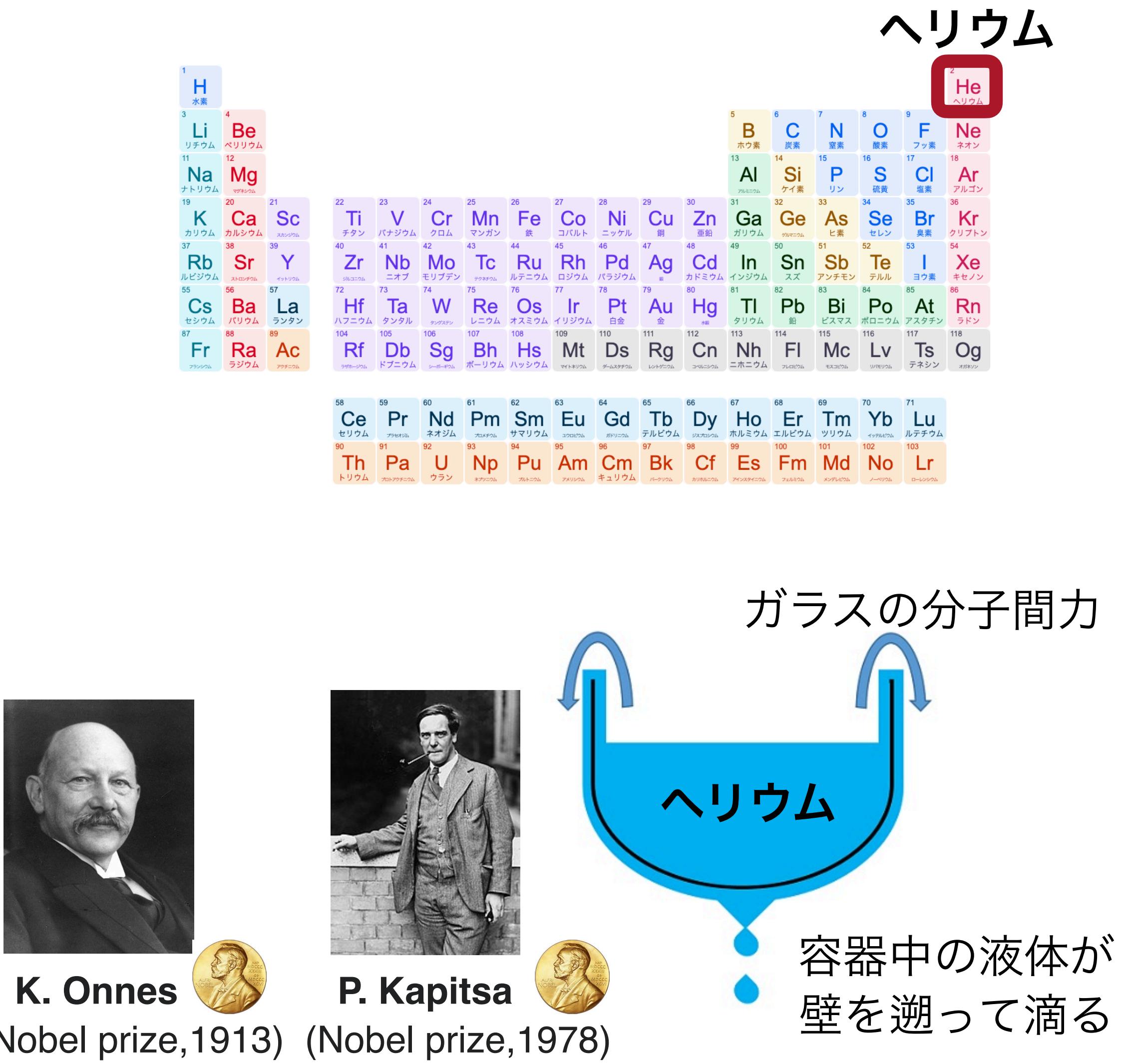
1 H	水素
3 Li	リチウム
4 Be	ベリリウム
11 Na	ナトリウム
12 Mg	マグネシウム
19 K	カリウム
20 Ca	カルシウム
21 Sc	スカイプル
37 Rb	ルビジウム
38 Sr	ストロンチウム
39 Y	イットリウム
55 Cs	セシウム
56 Ba	バリウム
57 La	ランタン
87 Fr	ラジウム
88 Ra	ラジオニウム
89 Ac	アクチニウム
58 Ce	セリウム
59 Pr	プリモリウム
60 Nd	ネオジム
61 Pm	プロメチニウム
62 Sm	スマリウム
63 Eu	エウロピウム
64 Gd	ガドリュウム
65 Tb	テルビウム
66 Dy	ジルビウム
67 Ho	ホルミウム
68 Er	エルビウム
69 Tm	ツリウム
70 Yb	イッペルトウム
71 Lu	ルテチウム
90 Th	トリウム
91 Pa	プロトアクチニウム
92 U	ウラン
93 Np	オプニウム
94 Pu	ブロトニウム
95 Am	アムベリウム
96 Cm	キュリウム
97 Bk	バクタリウム
98 Cf	カーリウム
99 Es	エシルリウム
100 Fm	フュルマニウム
101 Md	メンドレリウム
102 No	ノーベリウム
103 Lr	ローランジウム

## ヘリウム



# 物質における量子力学

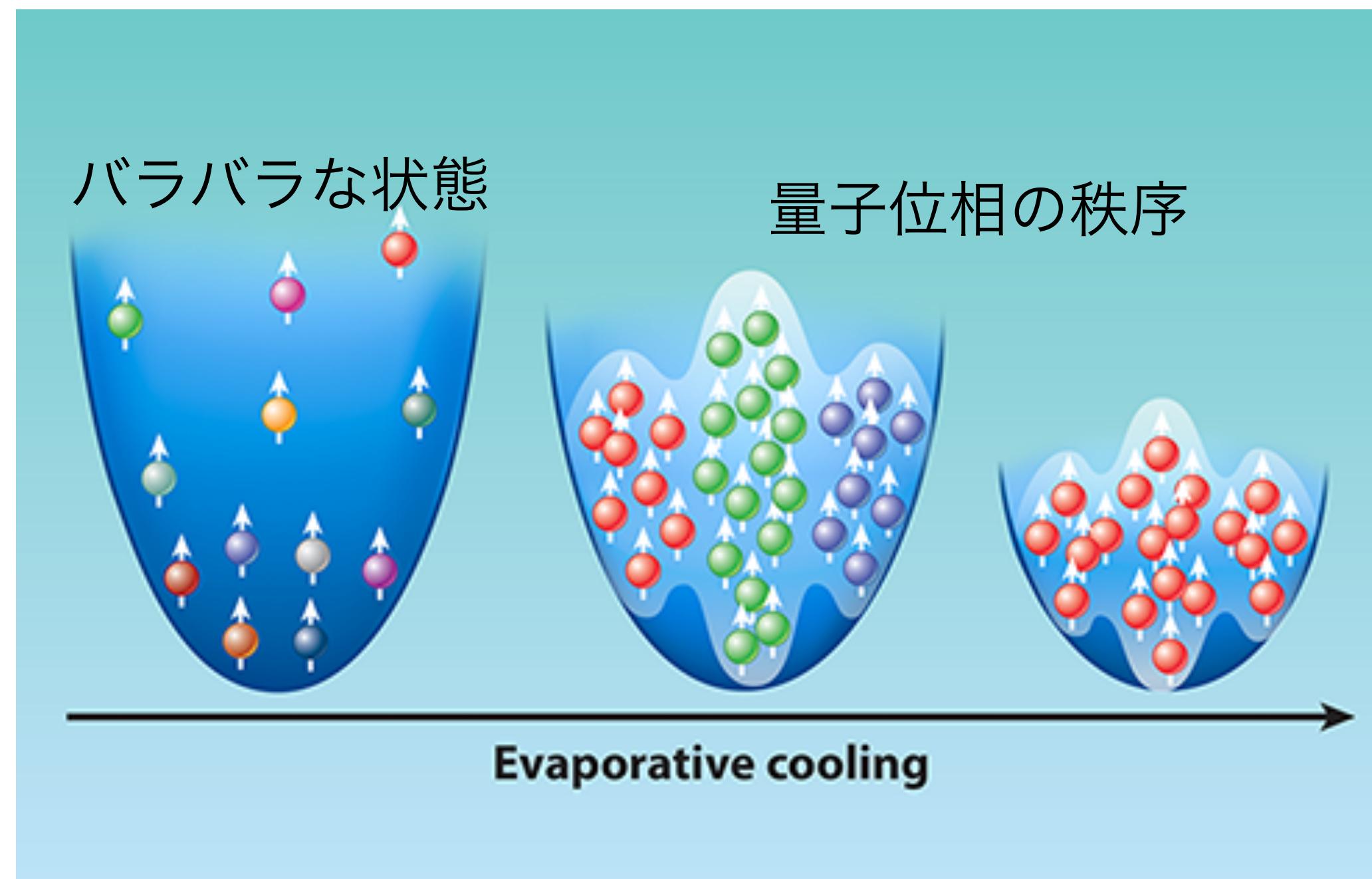
量子力学を必要とする問い合わせの例：物質を冷やすとどんな状態になるか？



# 物質における量子力学

## 超流動状態・超流動相（抵抗なしにマクロな流れ）

- 古典力学では説明不可能
- 多数の原子の量子力学的位相が揃うことによる帰結

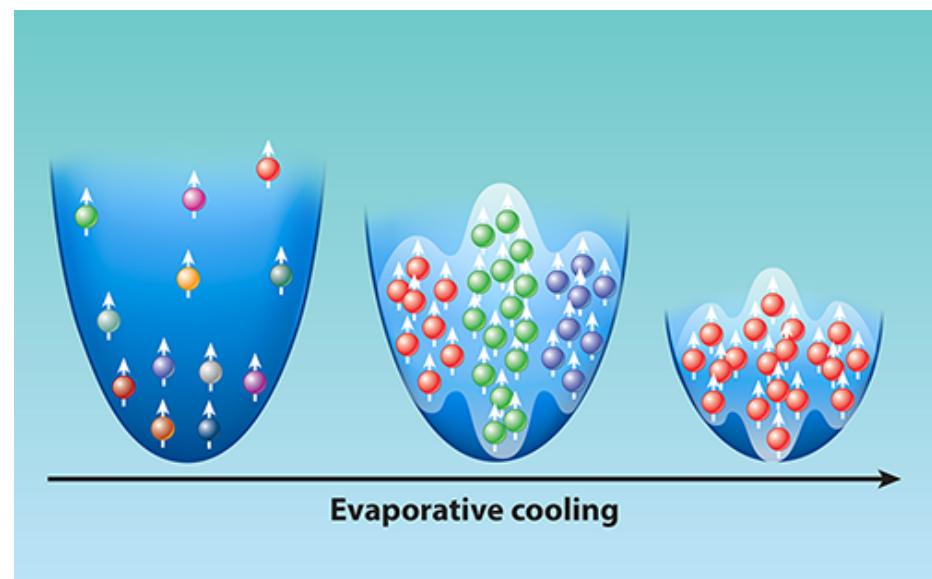


Physics 14, 85 ('21)

# 量子力学・量子現象の広がり

Q. 他にも量子力学を必要とする分野・現象はある?

超流動



超流動/超伝導

トンネル効果

人工光合成

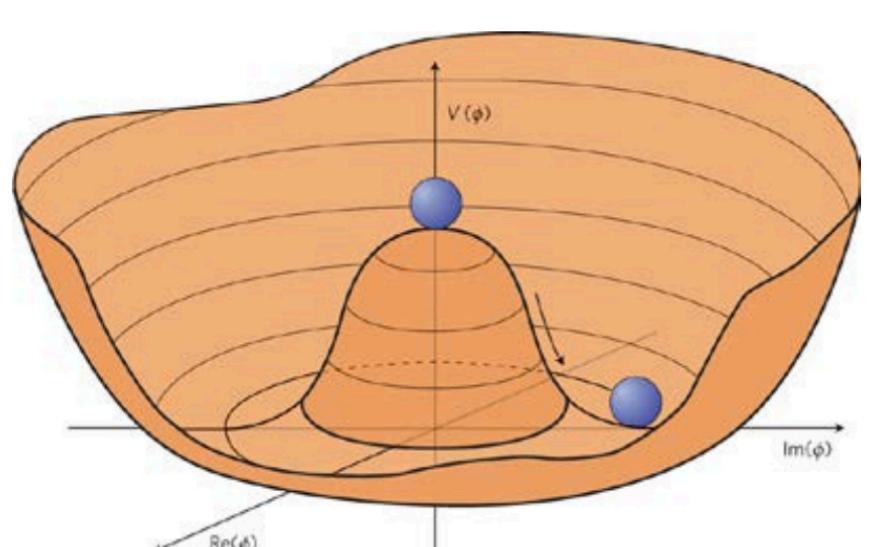
物質設計

量子物理

化学現象

量子多体现象・  
量子多体問題

ヒッグス機構



Scientific background for Nobel prize,  
(2013)

基礎物理

質量の起源

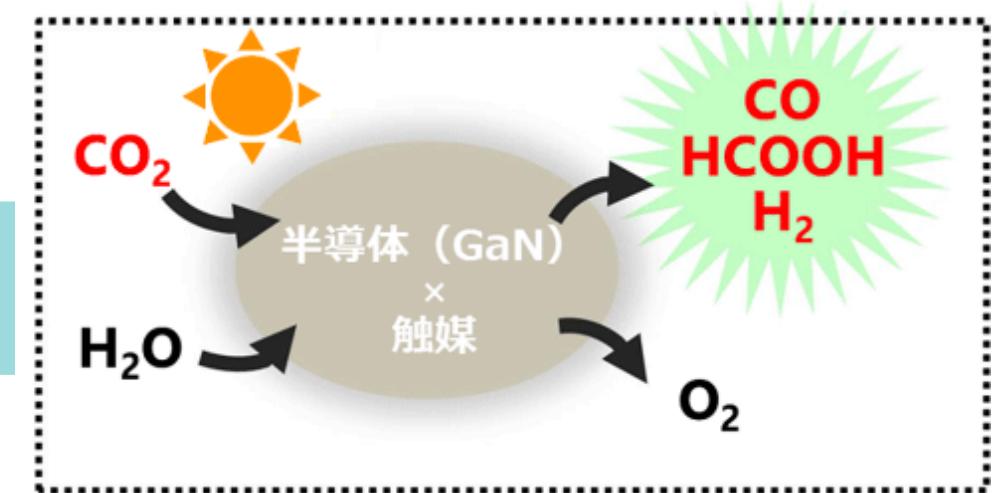
初期宇宙

量子技術

エンタングルメント

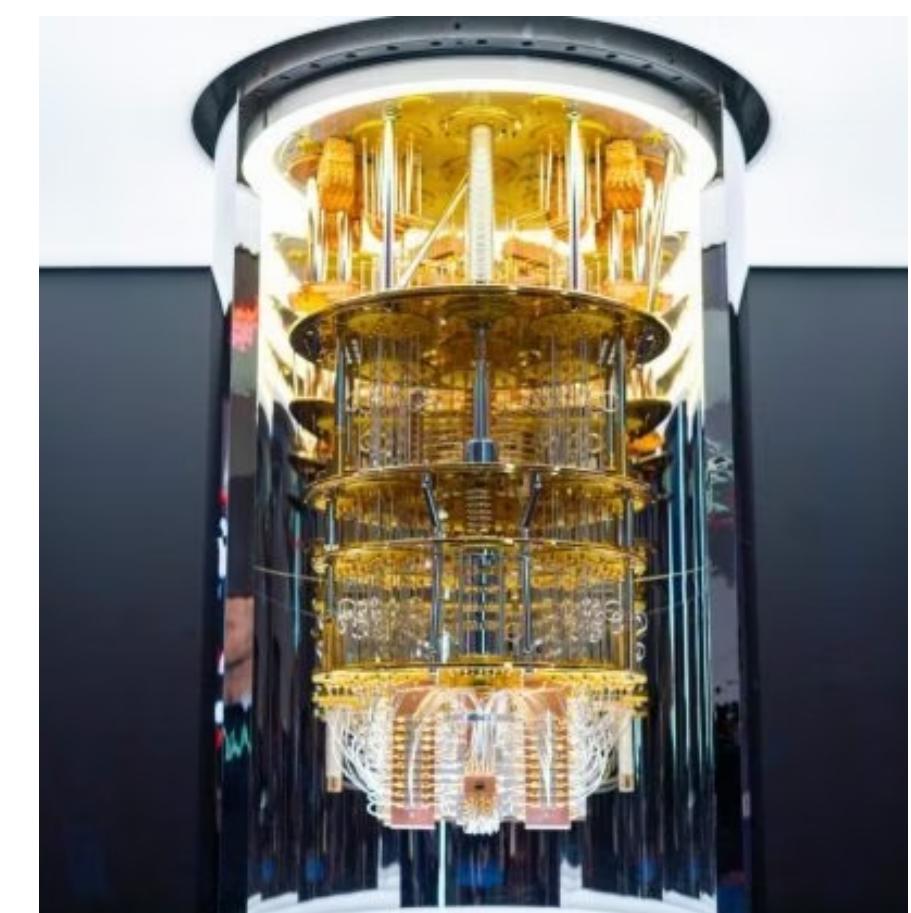
量子計算機

人工光合成



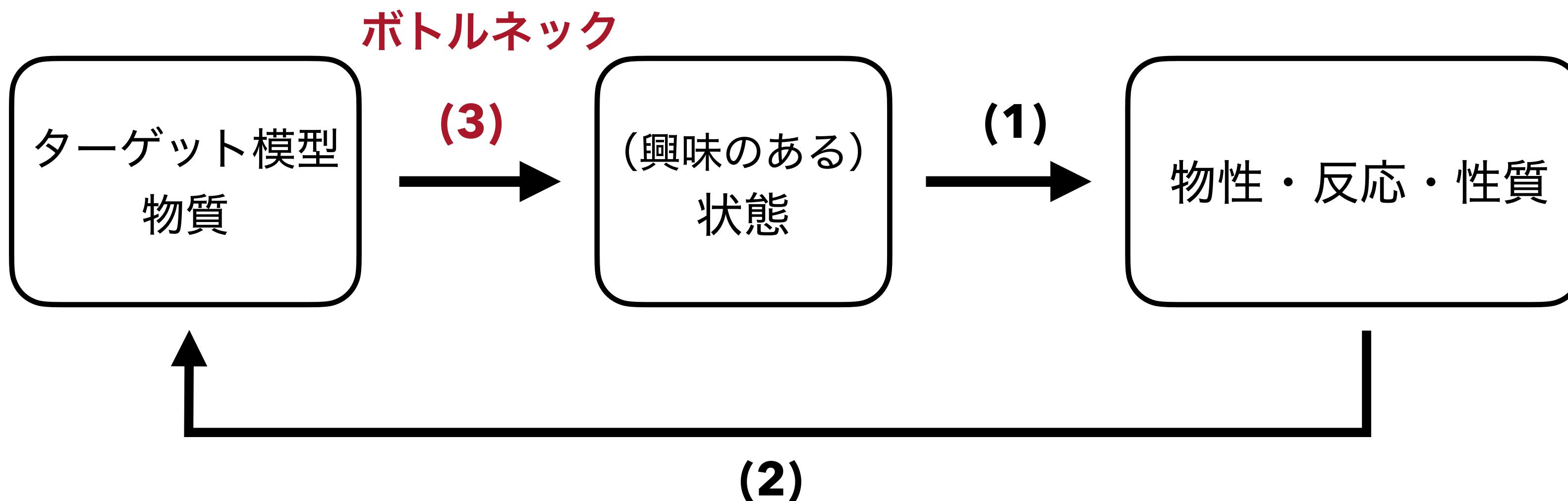
NTT research

超伝導量子計算機



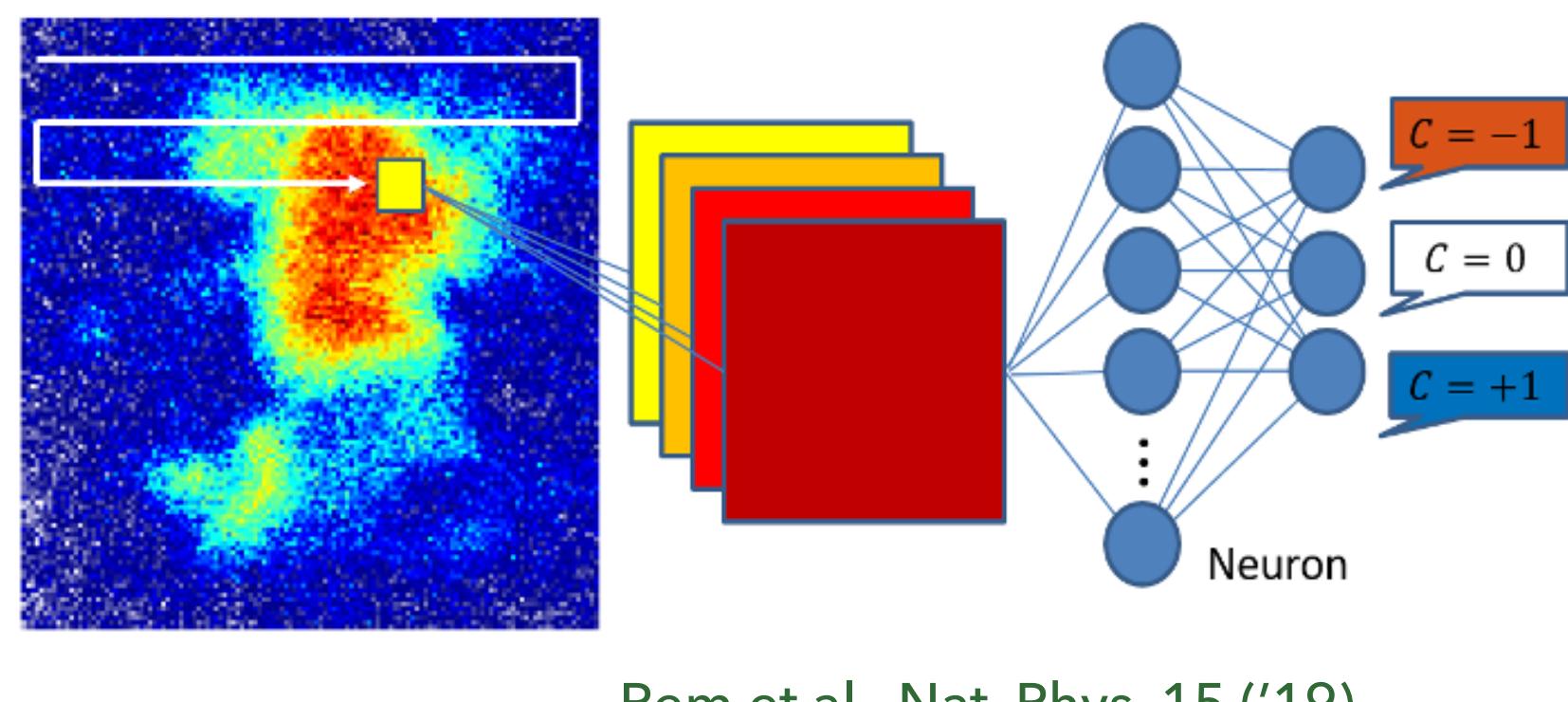
IBM

# 量子多体問題への情報科学的アプローチ



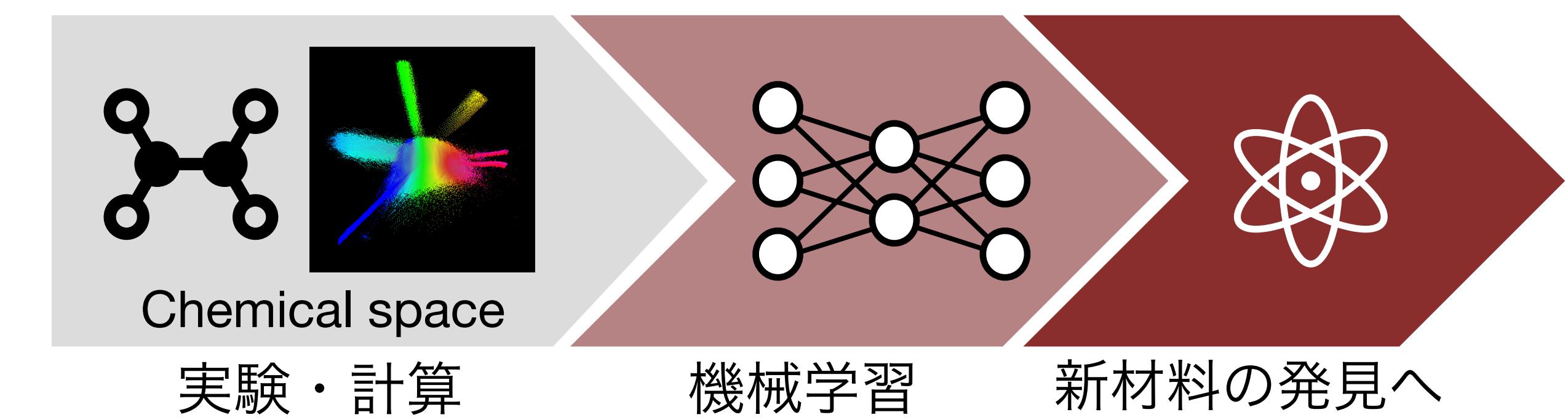
## (1) 「量子状態」の識別

顔認識ならぬ「量子状態認識」



## (2) リバース・エンジニアリング

材料生成AIの創成へ (データ数が課題)



# 量子状態の特徴抽出

(3) にて(理論の)データを得るにはシュレーディンガー方程式を解かないといけない。

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$$

ハミルトニアン 波動関数 エネルギー

↓ ニューラルネットで  
学習

$$H \left| \begin{array}{c} \text{ニューラルネット} \\ \text{で} \\ \text{学習} \end{array} \right\rangle = E \left| \begin{array}{c} \text{ニューラルネット} \\ \text{で} \\ \text{学習} \end{array} \right\rangle$$

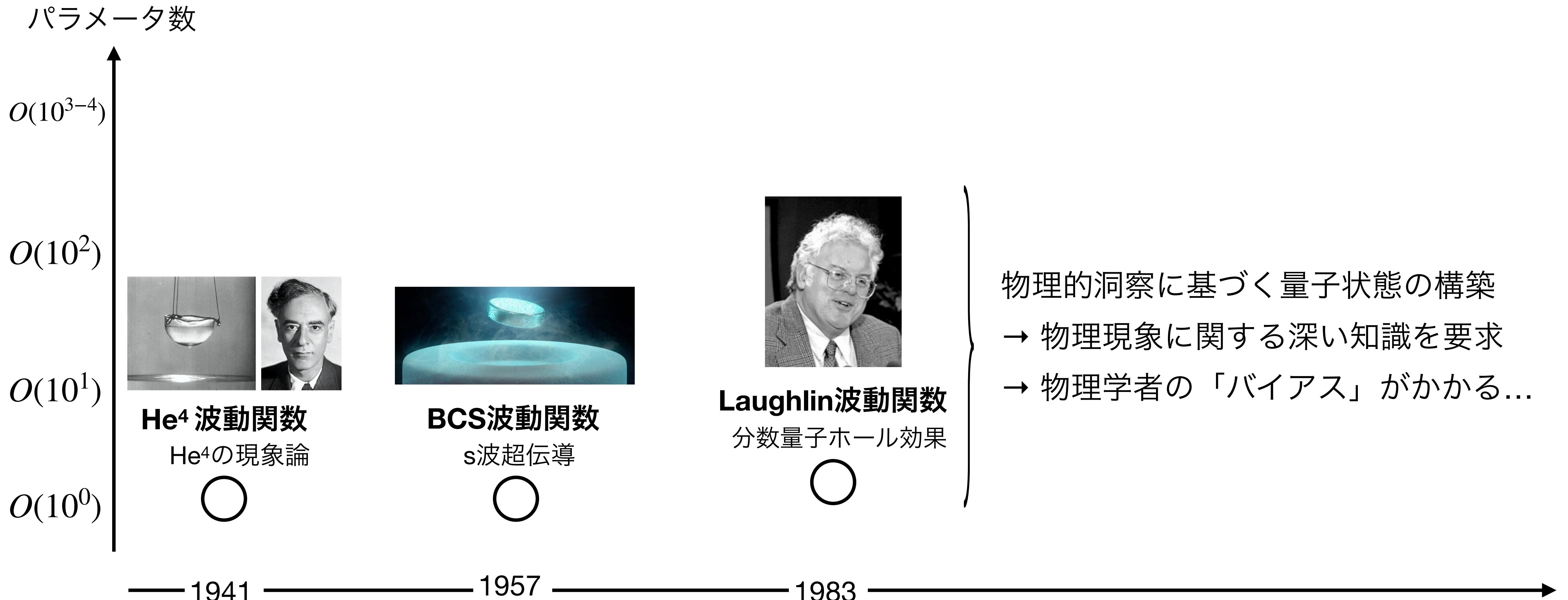


大規模へのスケール

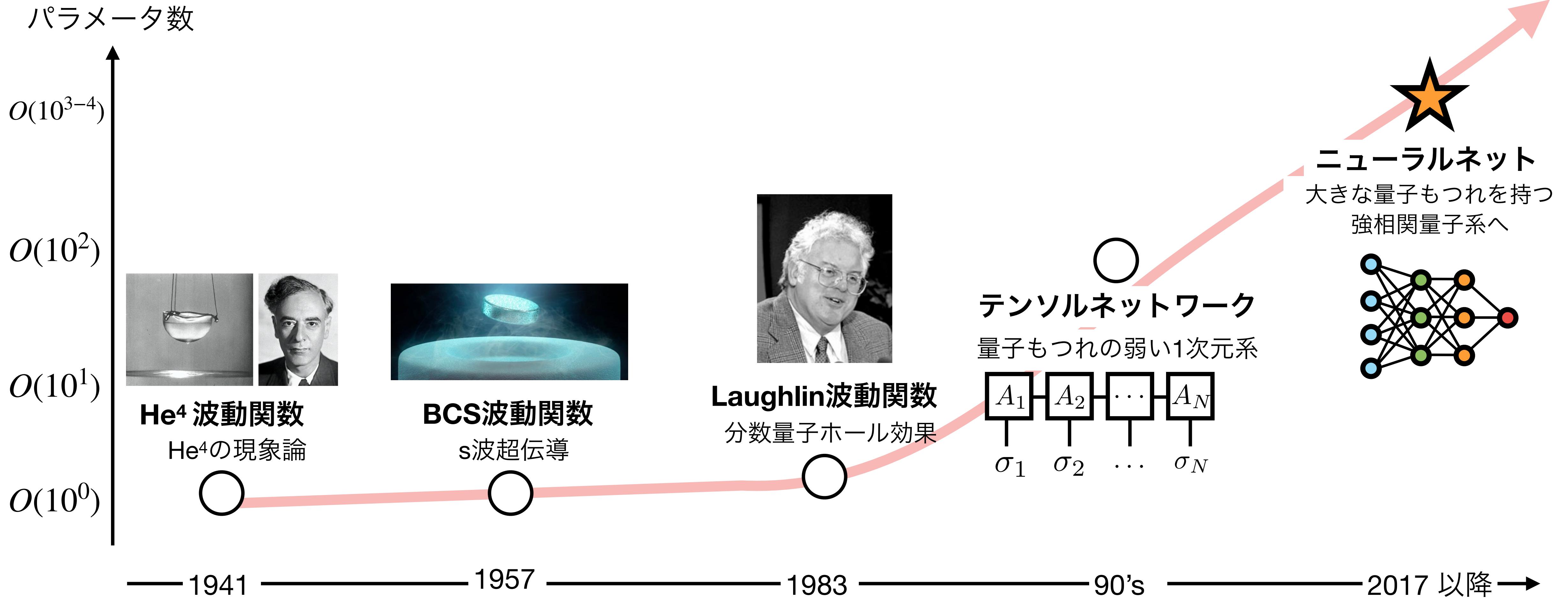


一般に精度保障なし

# 特徴抽出のこれまで



# 特徴抽出のこれまで

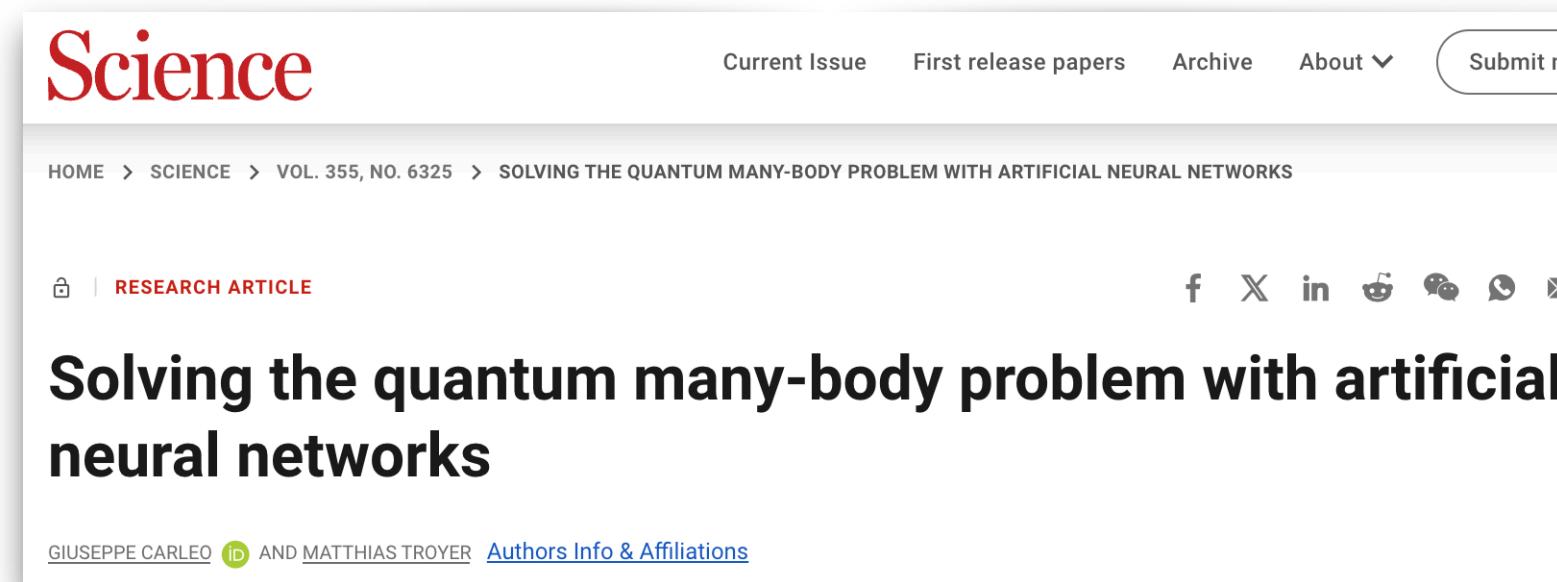
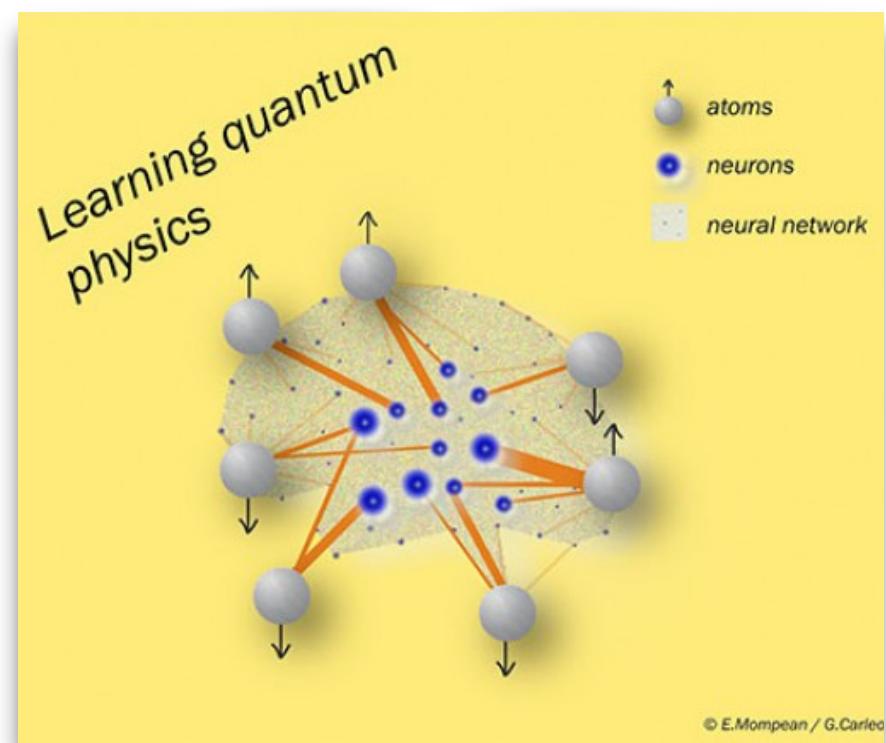


系の事前知識を仮定しない（バイアスのない）手法の開発へ  
トレンドが移行

# これまでの研究

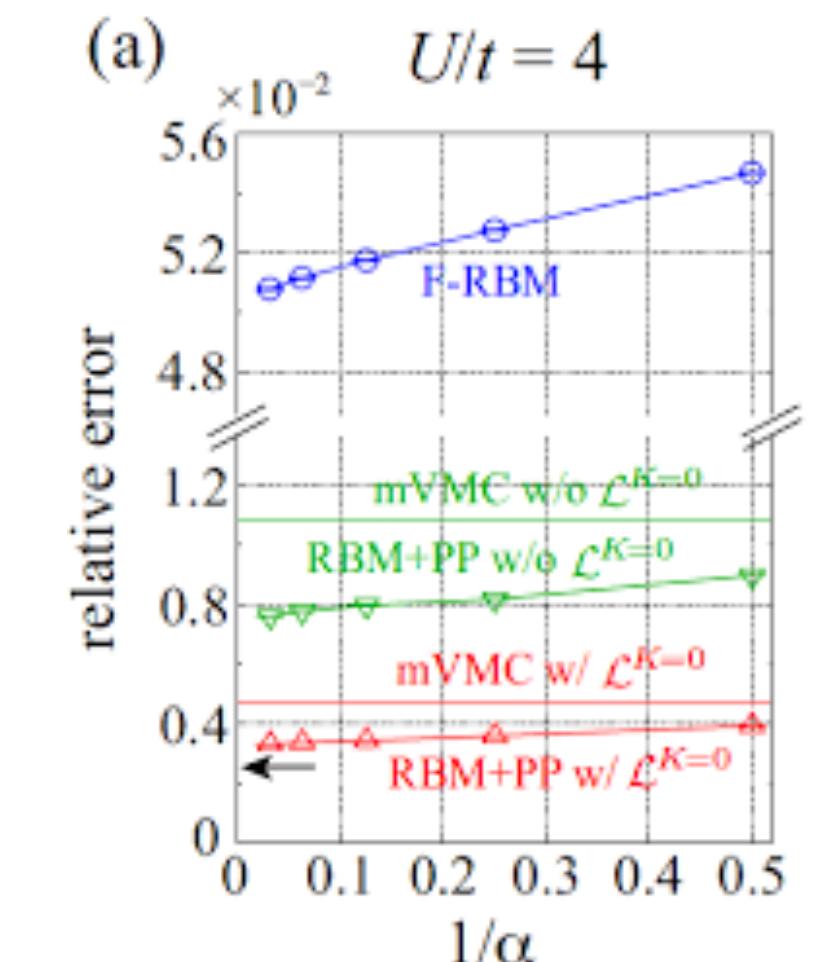
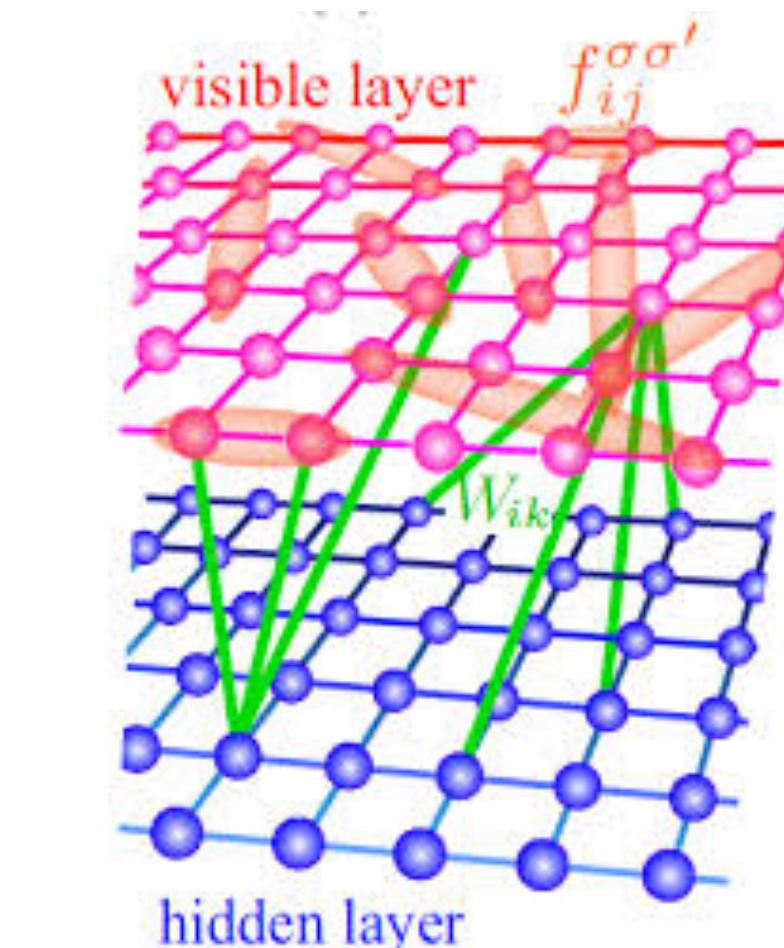
## 量子スピン模型

代表的な量子多体模型における初めてのベンチマーク



Carleo&Troyer, Science ('17)

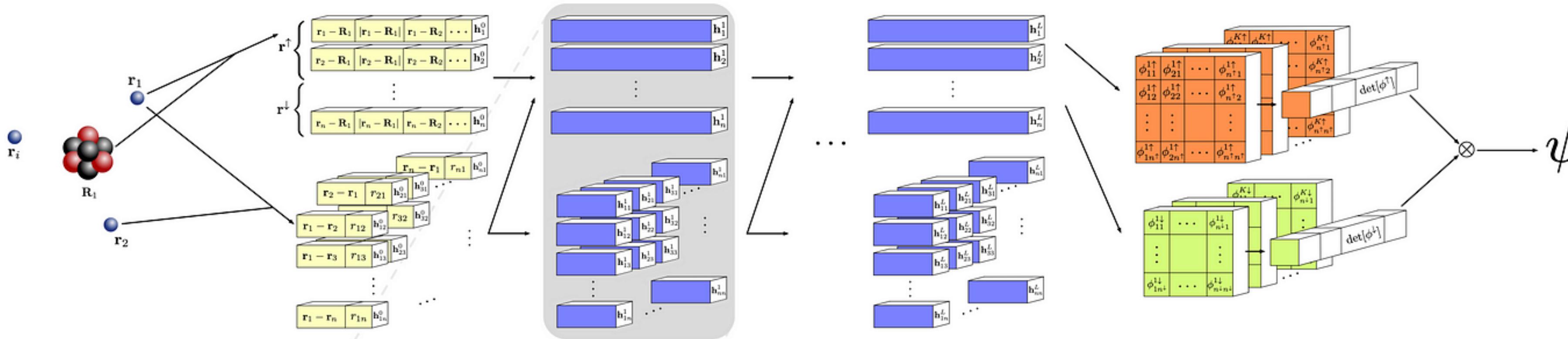
## フェルミオン模型（電子状態の近似模型）



Nomura et al., PRB ('18)

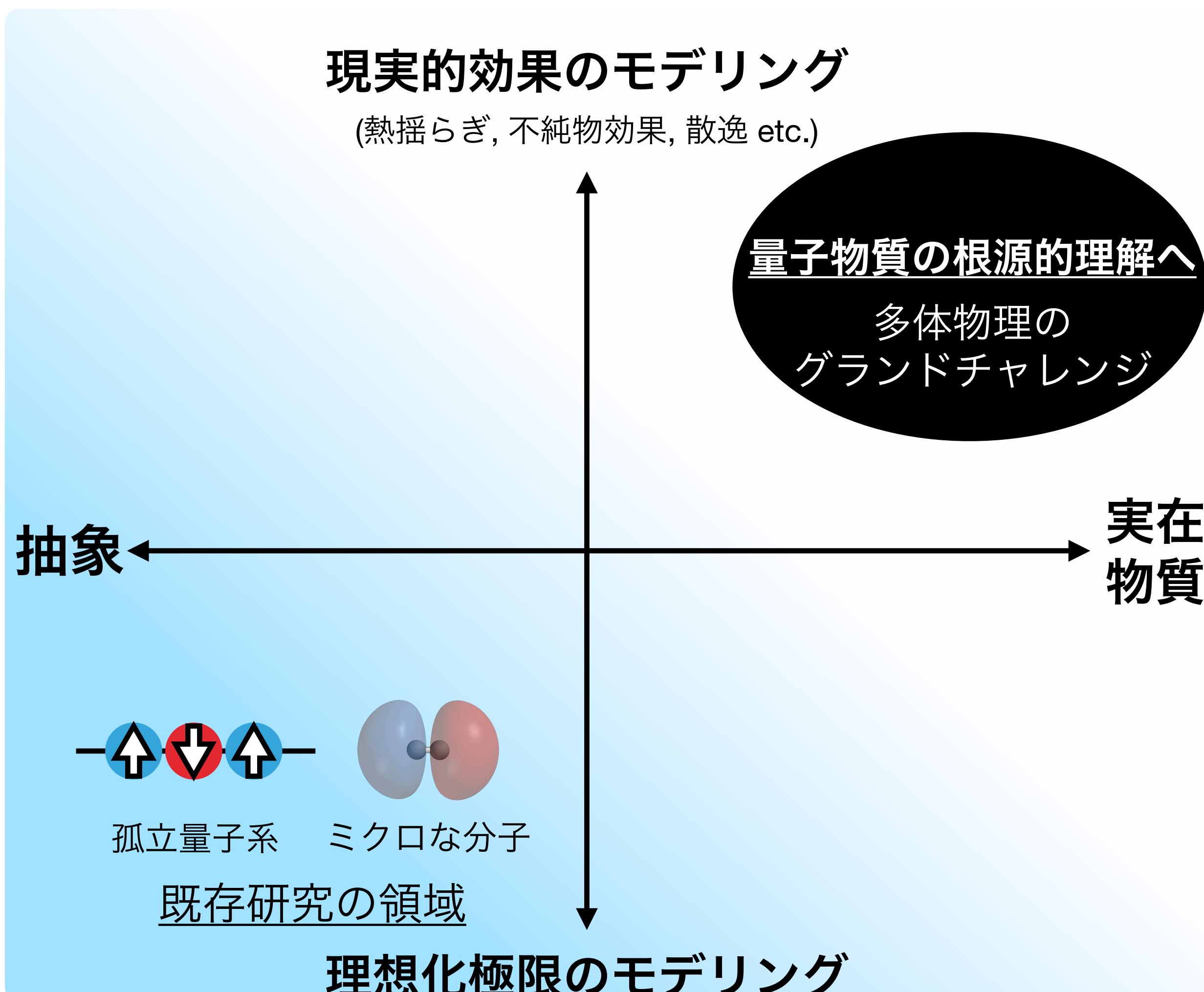
## 分子系の電子状態への適用

Deepmind, Bytedanceのような企業も参戦し世界中で競争が激化

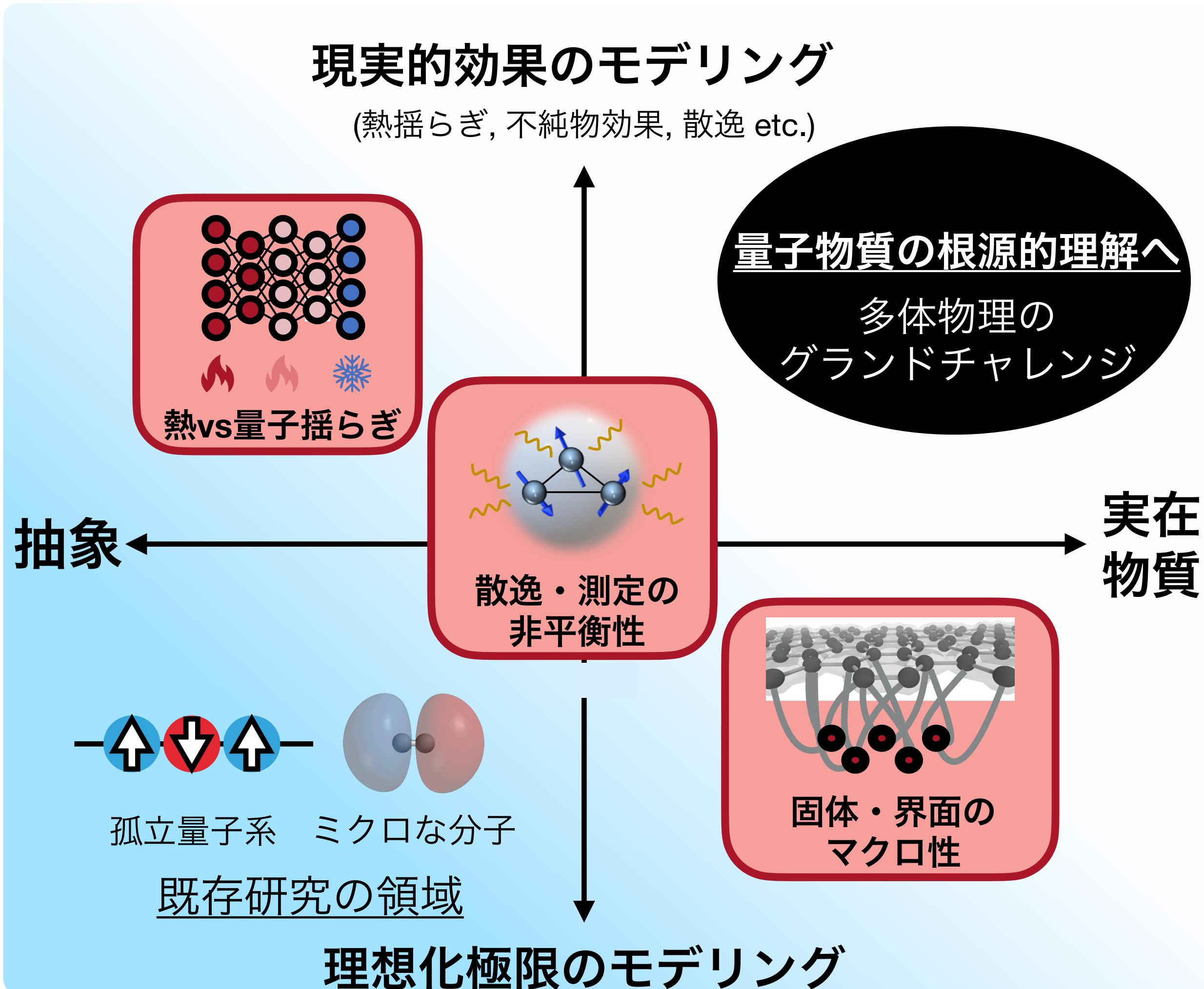


Pfau et al., PRR ('20)

# これまでの私の研究



# これまでの私の研究



- 有効な計算手法の限られた領域におけるニューラルネット活用  
(強相関量子系における熱搖らぎ・散逸効果)

**NY & Hamazaki, PRB ('19)**

Nomura\*, **NY\***, Nori, PRL ('21) (\*Equal contribution)

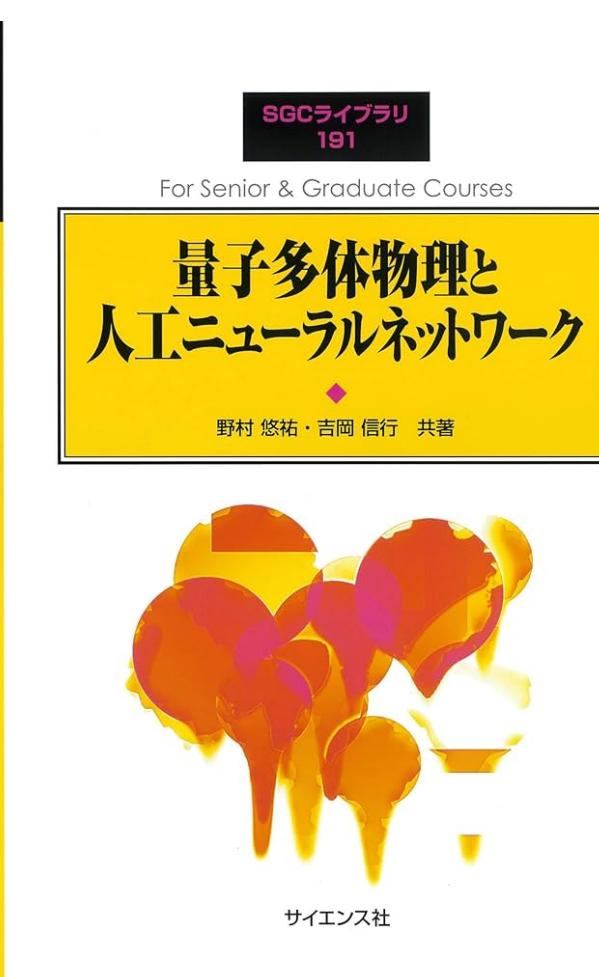
**NY, Mizukami, Nori, Commun. Phys. ('21)**

- 热ノイズ・散逸ノイズの計算精度・規模は世界最大級を記録

- 後者は米国物理学会で特集記事

- 教科書の執筆

(w/ 東北大学 野村教授)



# ニューラルネットワークによる量子散逸のシミュレーション

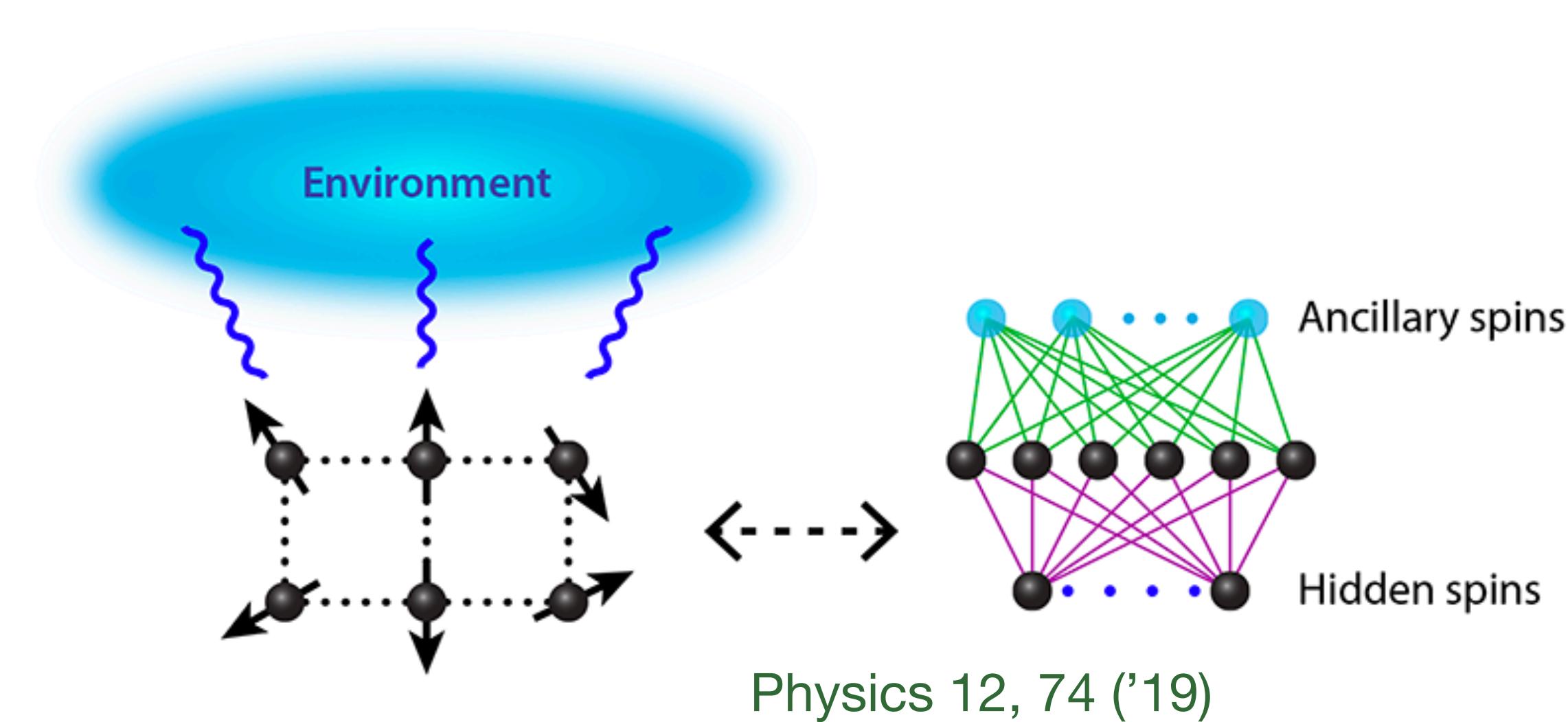
- (1) 単一原子への測定・制御・散逸は、従来の物理学では取り扱わない
  - (2) 古典相関・量子相関が混ざるケースの物理的直感が欠如
- 大規模計算に有効な数値手法までもが未知

私の貢献：ニューラルネット表現の効率性 **NY & Hamazaki ('19)**

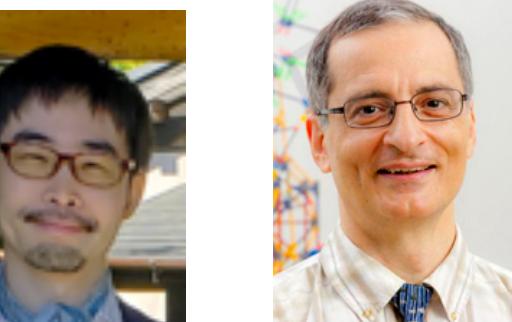
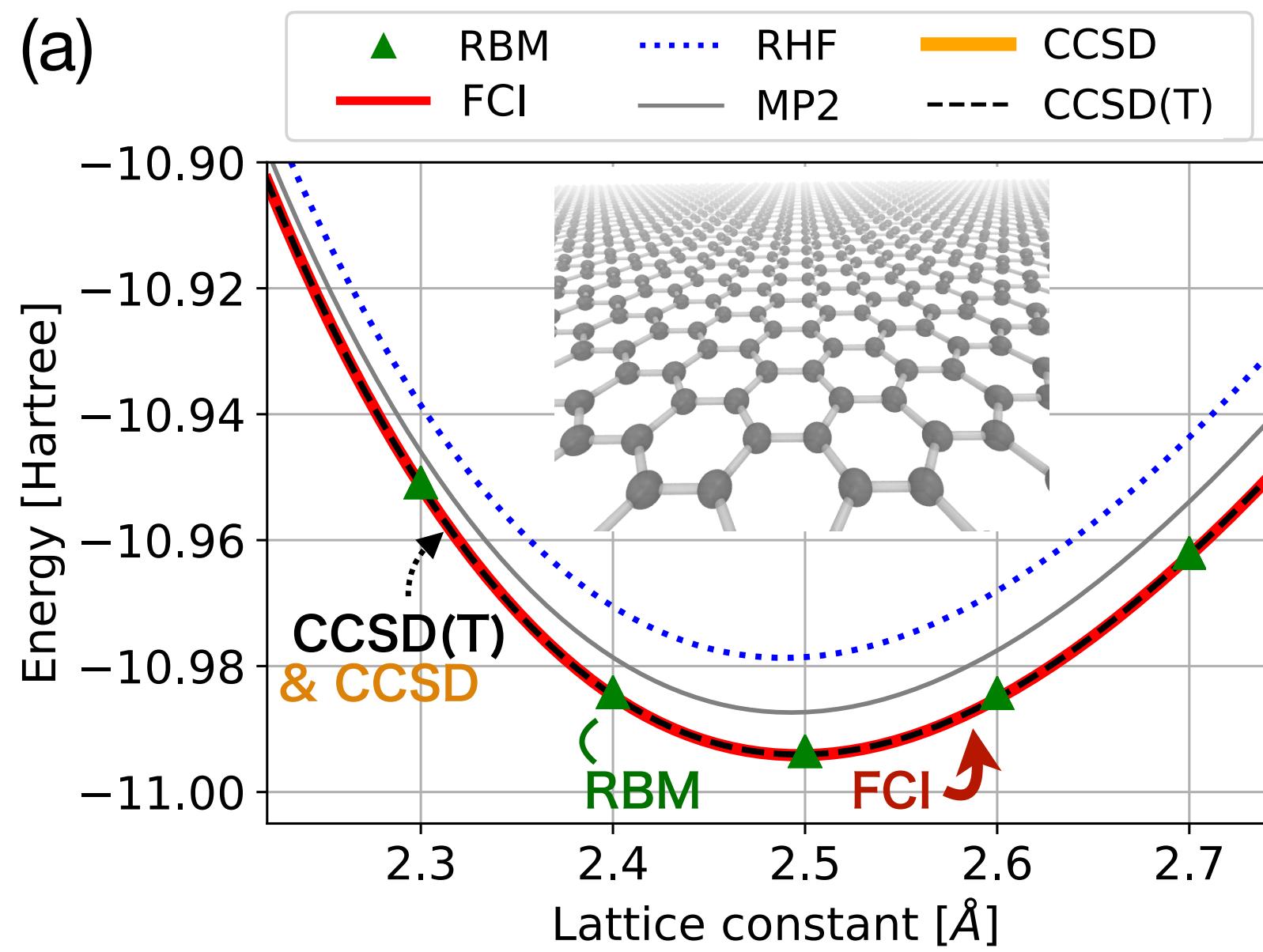
- 相関の理解が不完全 → 「自動抽出」が威力を発揮



濱崎立資博士  
(理研CPR)

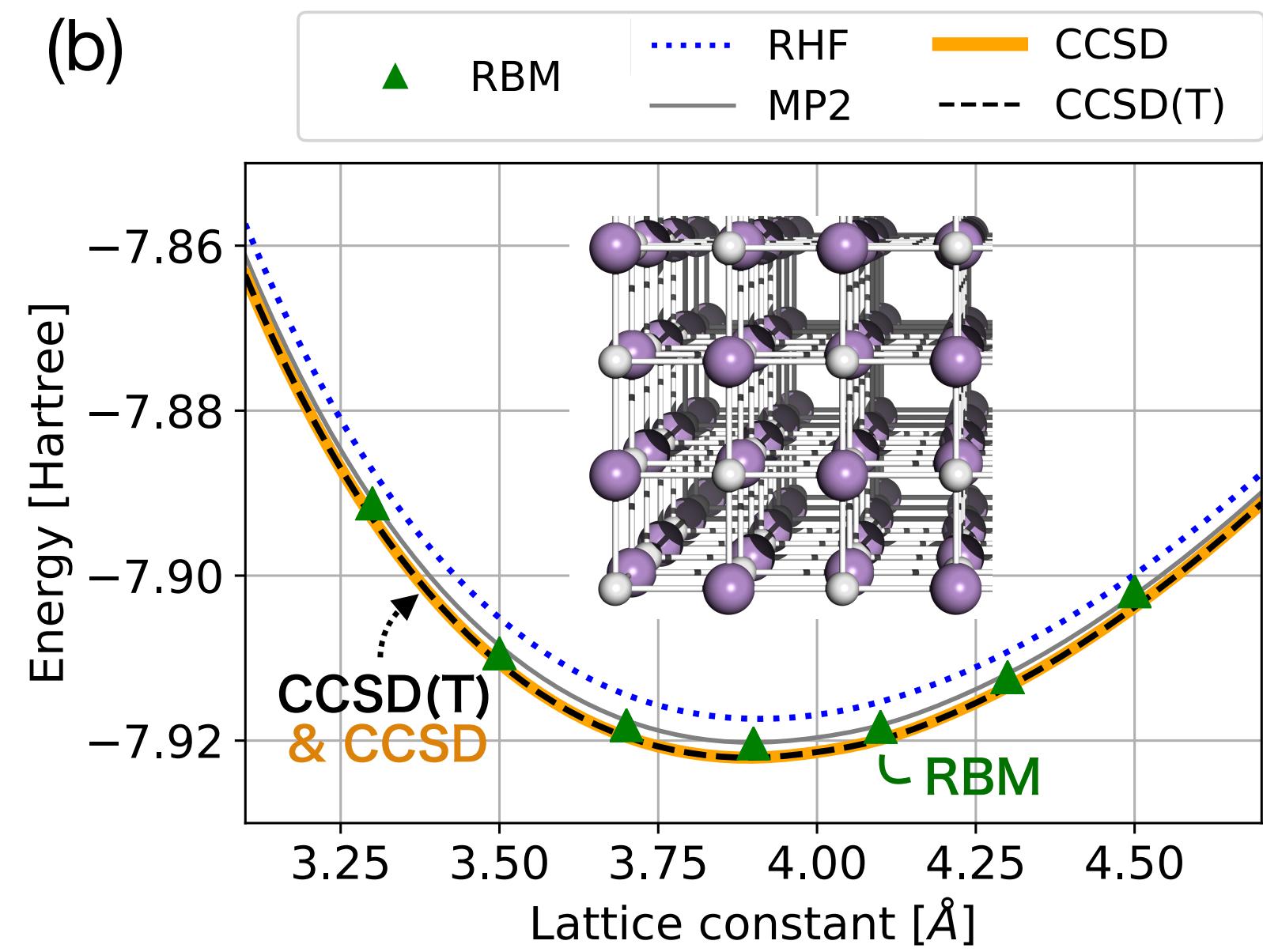


## 2D: グラフェン(炭素化合物)

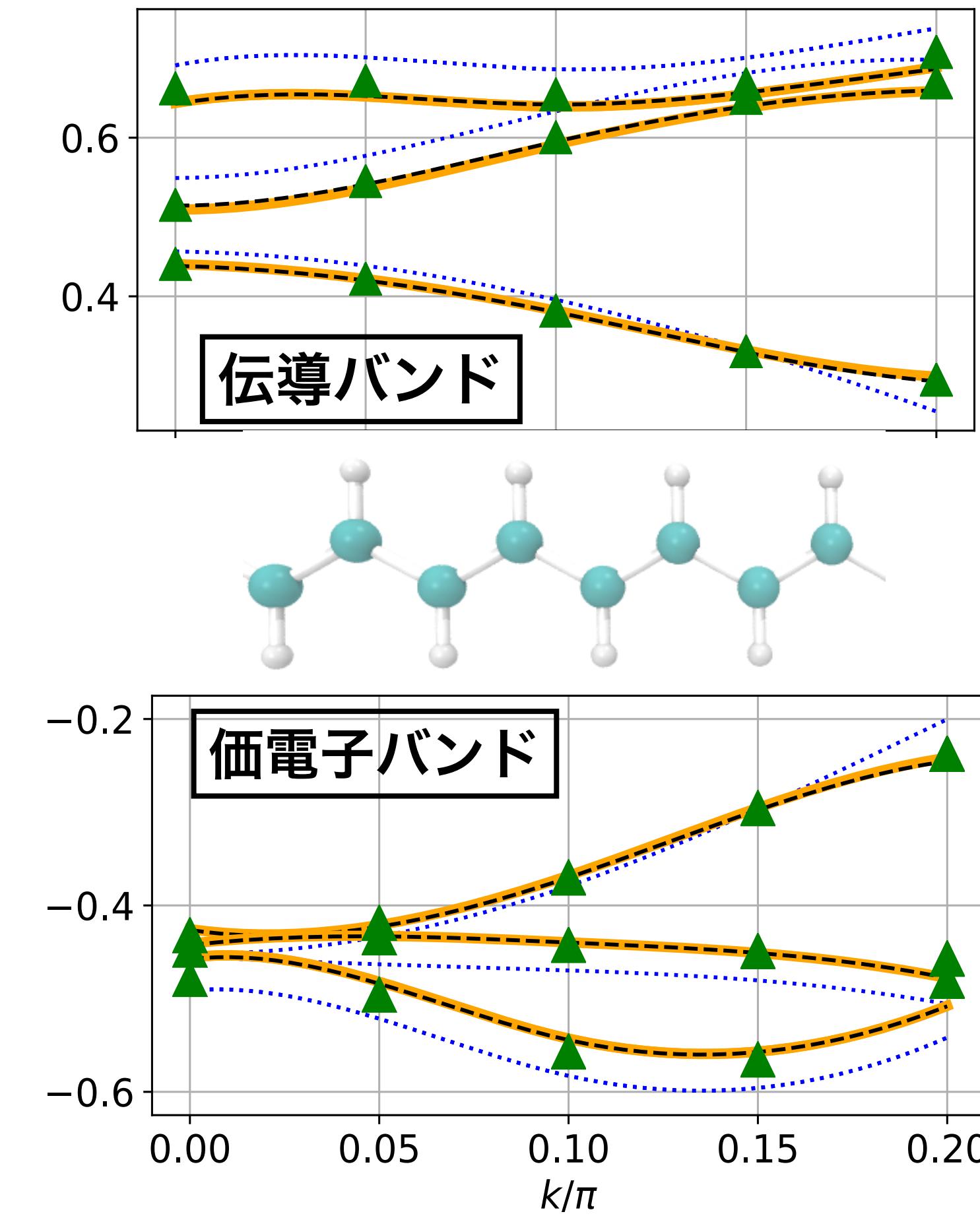


水上教授 F. Nori

## 3D: LiH結晶

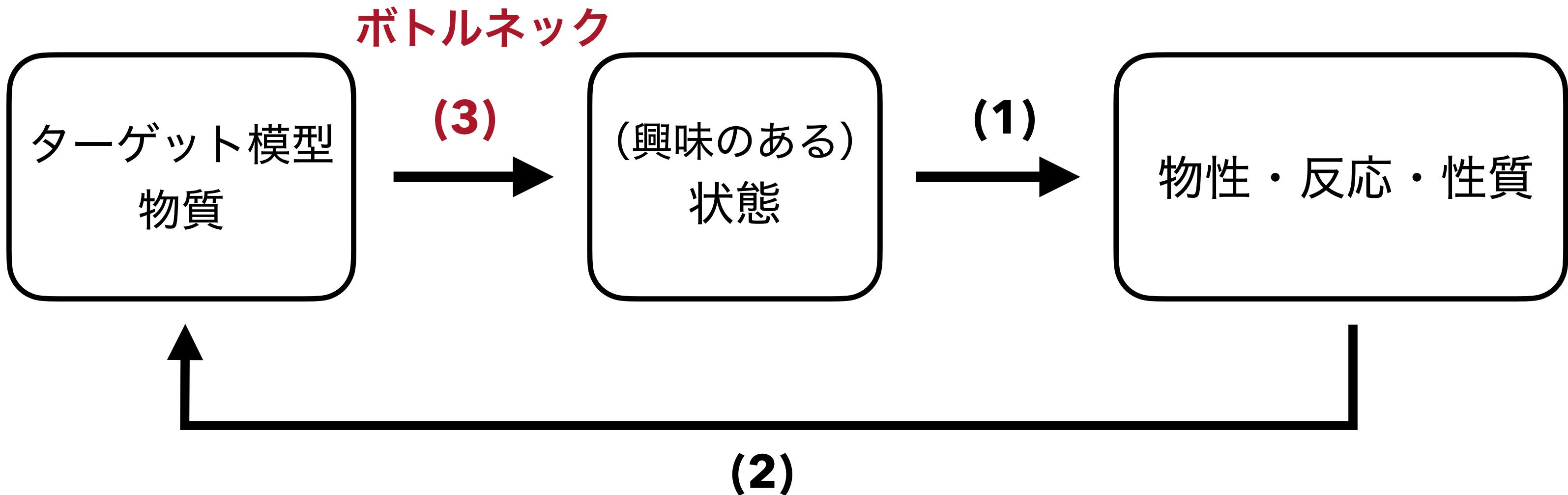


ポリアセチレン



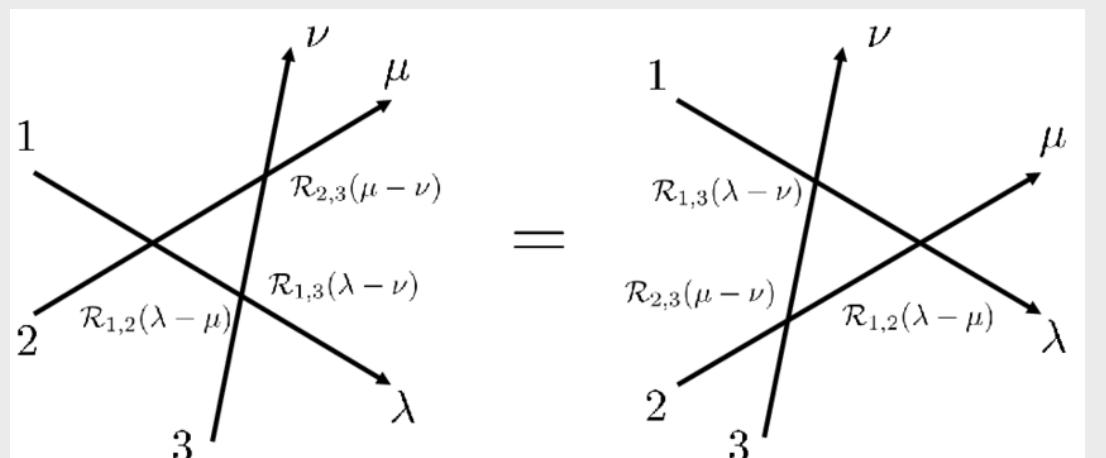
1D 強相関系、2&3D 弱相関系における高精度計算手法を実証

# 量子多体問題へのアプローチ：量子デバイス



## 理論解析を駆使

- 数学的厳密性
- △ 「解ける」 モデルの少なさ



## 古典シミュレーション

- ノイズのない計算・再現性
- △ 「次元の呪い」

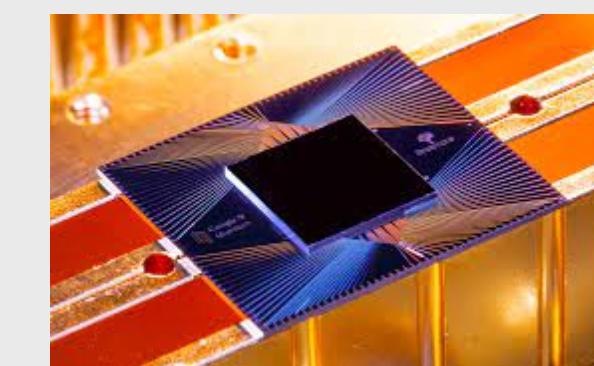


富岳コンピュータ

## 量子シミュレーション

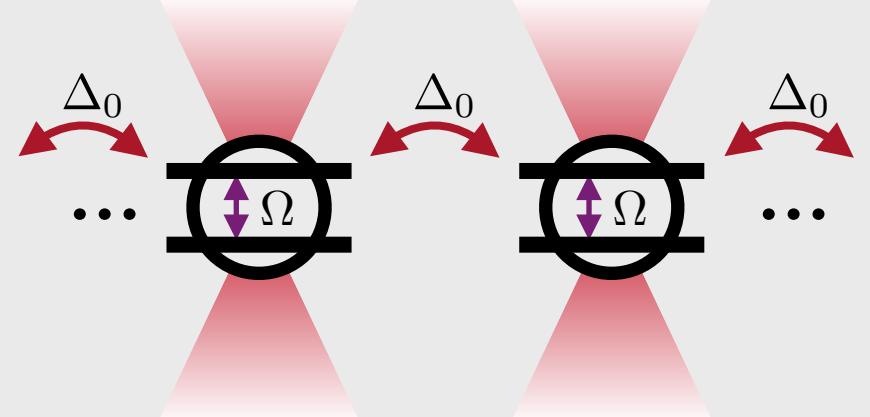
- 次元の呪いなし、量子加速
- △ ハードウェアのノイズ

### 超伝導量子ビット



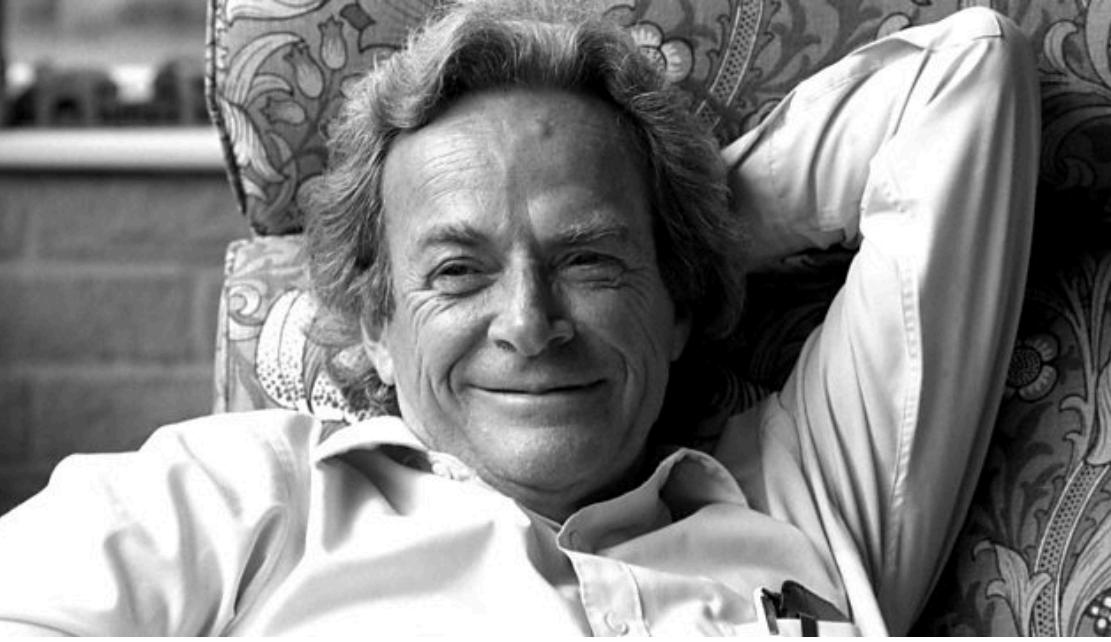
Google Sycamore

### 光ピンセット



# 量子計算と量子多体物理

## 量子シミュレーション



**Richard. P. Feynman (1918 - 1988)**

量子系の古典計算が難しいなら、  
制御可能な量子系 자체を使って計算してやればいい

*International Journal of Theoretical Physics, Vol. 21, Nos. 6/7, 1982*

### Simulating Physics with Computers

Richard P. Feynman

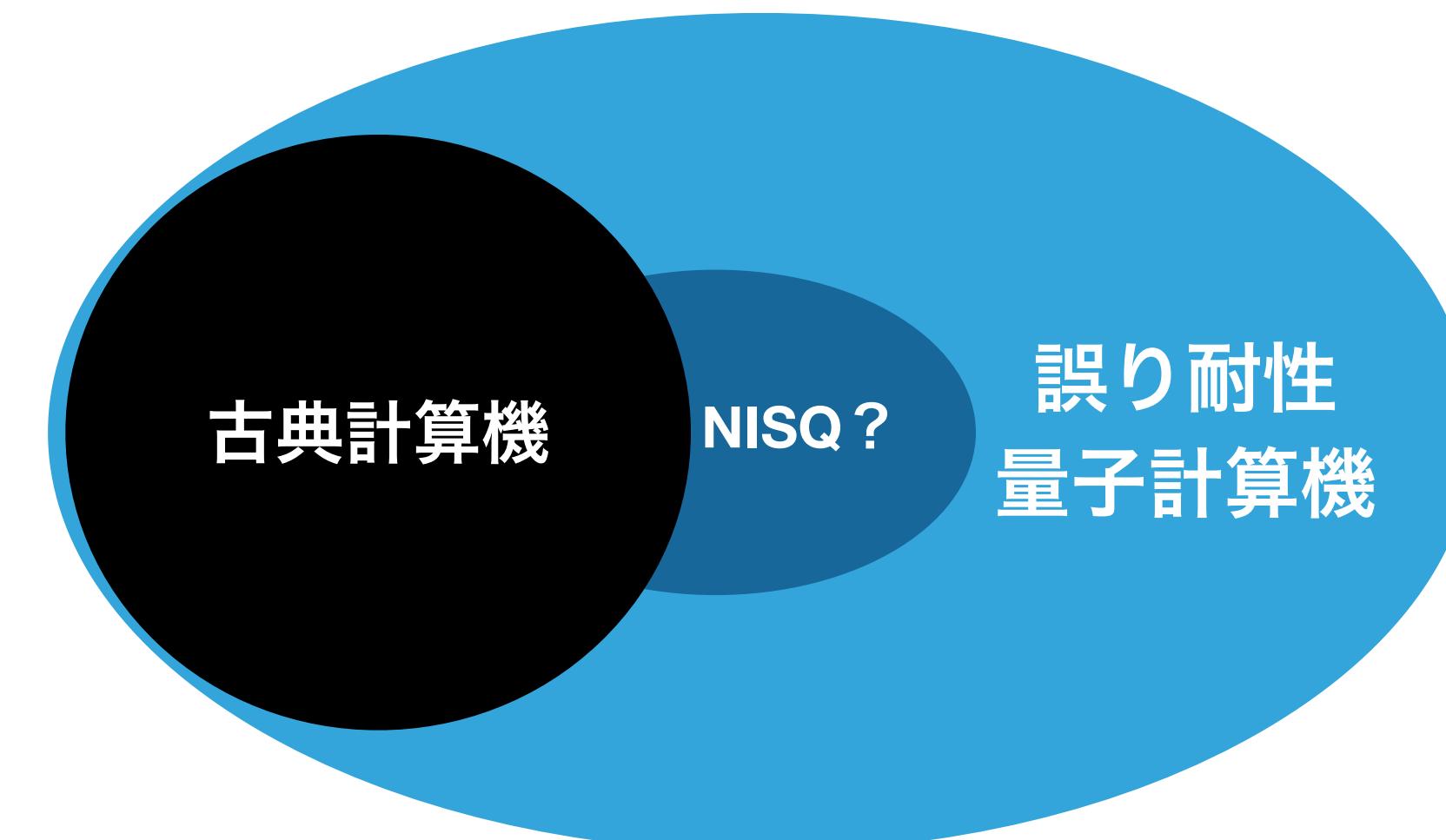
*Department of Physics, California Institute of Technology, Pasadena, California 91107*

*Received May 7, 1981*

## 量子計算のメリット

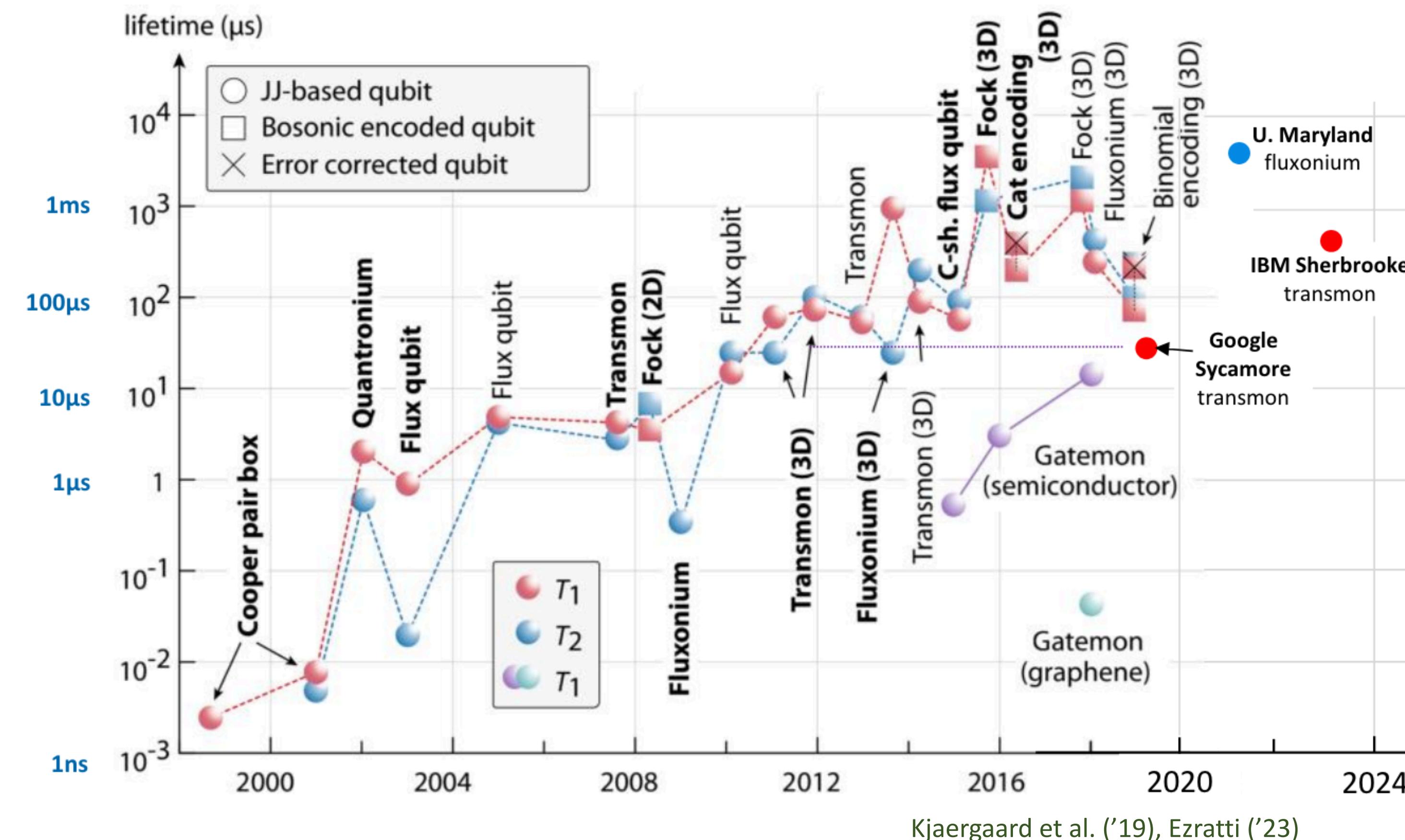
計算機自体が量子力学に従って動作するため、次元の呪いなし

量子多体問題は格好のターゲット



# これまでの量子デバイス

- ・ 着々と素子（量子ビット）の性能が良くなっている
- ・ 素子の数も増えている（量子版ムーアの法則？）



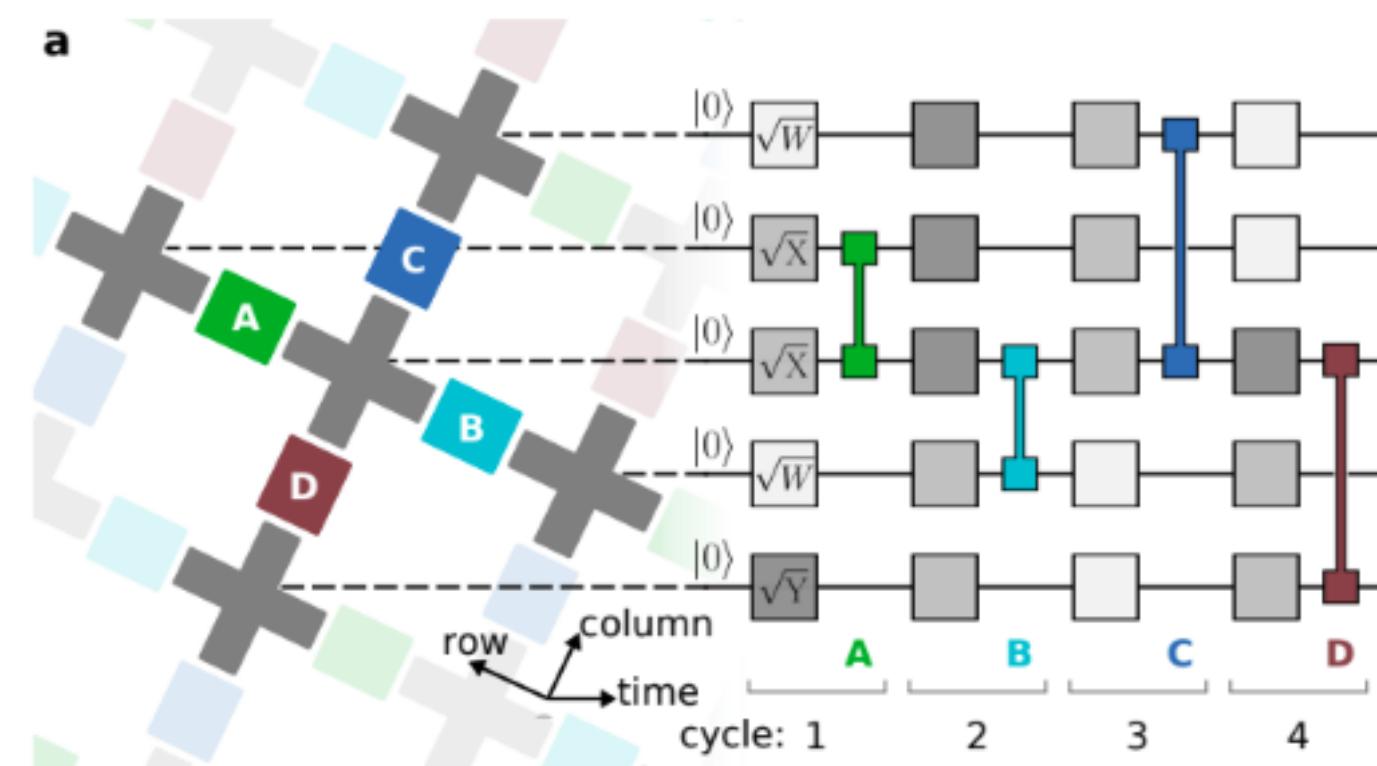
# これまでの量子計算

## ランダム量子回路

2019: Googleによる量子超越性の実験



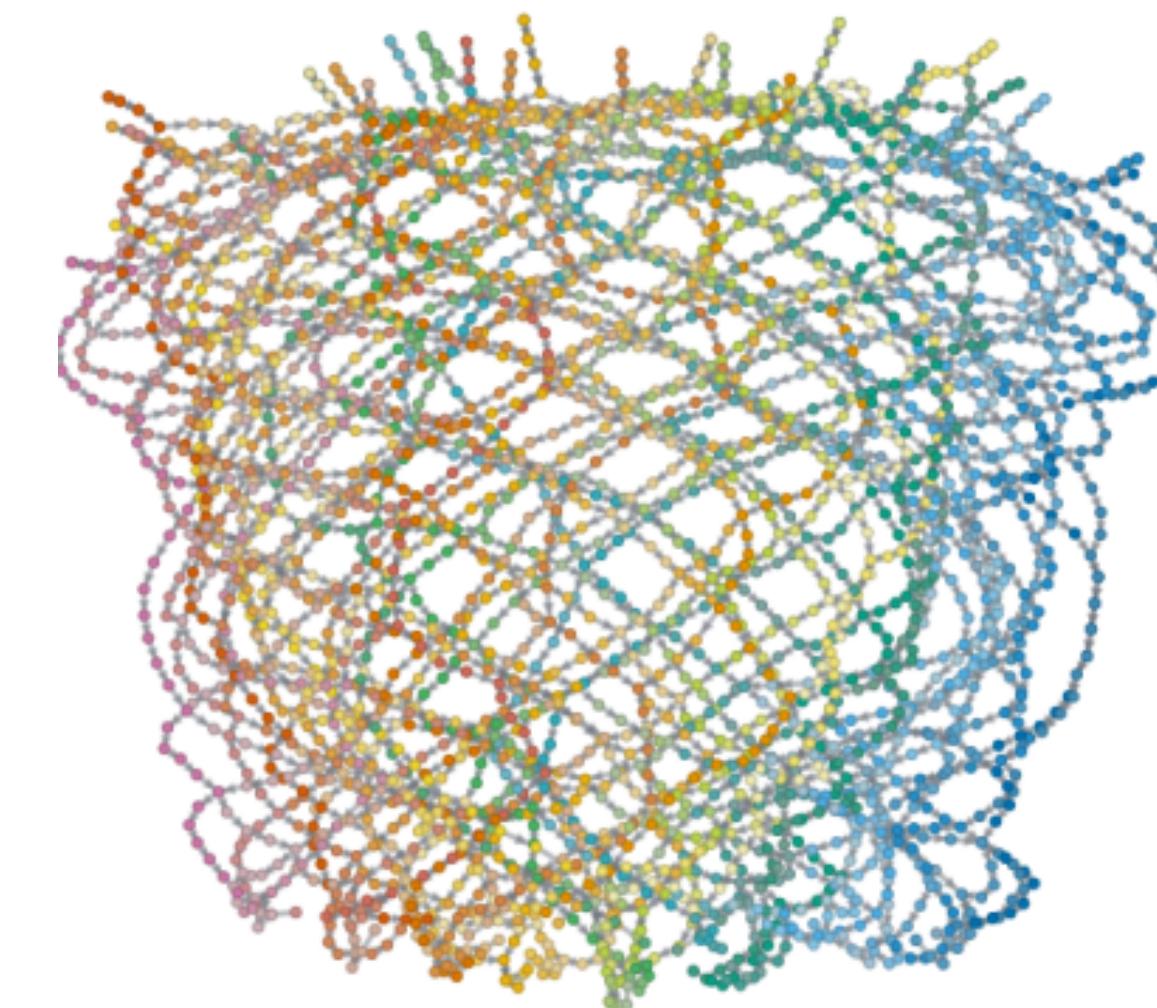
Google, Nature ('19)



## v.s. 古典計算機

- ・スパコンを活用し 300秒で Google実験をシミュレート  
(2021年のGordon-Bell賞)

Gray, ('19), Fu et al ('21)



Google実験 v2 Google, arXiv:2304.11119

70量子ビットの改良版。  
上のアルゴリズムを使っても何年もかかる

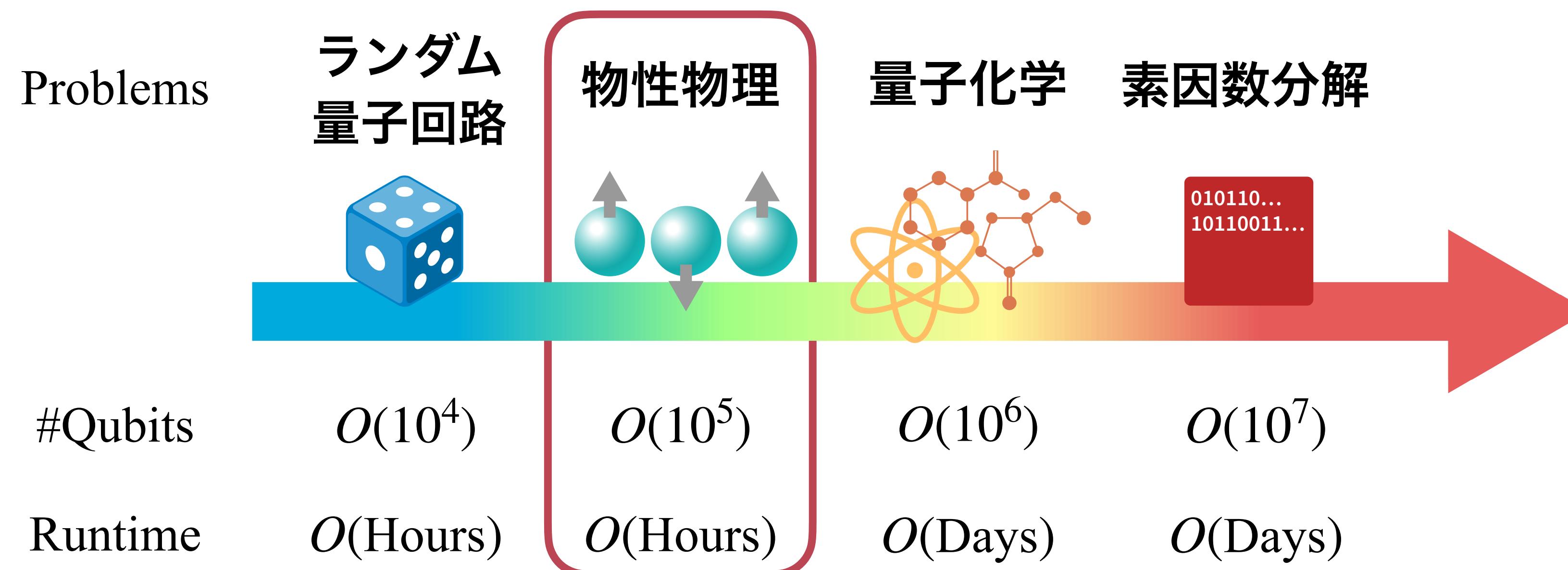
ランダム量子回路では量子に軍配が上がるよう

# これからの量子計算

## Q. 「実用的」な問題で量子優位性を発揮するには？

分野別の試算の結果、量子多体問題が適していると提案 [NY et al., npj Quantum Info. 45, 10 \('24\)](#)

(日経新聞・朝日新聞・日本工業新聞・MITテクノロジーレビューでも報道)



# まとめ

---

- ・量子 × 機械学習によるバイアスのない量子状態の計算・理解
- ・量子物理 × 量子計算機による「次元の呪い」の回避
- ・どちらのアプローチも盛り上がり始めたばかり。グランドチャレンジに向けて腰を据えて取り組みたい。  
いずれかが伸びるのか、両者の融合なのか、全く違うアプローチなのが未知数。  
人材育成・国内外との共同研究・産学連携にも力を入れていきます。