

RISMセミナーシリーズ第48回 データ駆動型AIセミナー(第12回)

量子コンピュータ×第一原理計算：古典コンピューティングとのより高度な融合を目指して

水上 渉 准教授 (大阪大学)

かつては夢の技術とされていた量子コンピュータですが、近年その開発は大きく進展しています。その量子コンピュータの応用先として、有望視されているのが第一原理計算です。本講演では、これまでの研究から明らかになってきた量子コンピュータを使った第一原理計算の問題点を述べ、その解決に向けた取り組みとして我々がおこなっている、古典アルゴリズムとのより高度な融合手法の開発を紹介します。

ニューラルネットワークで探る量子多体物性

吉岡 信行 助教 (東京大学)

近年の計算資源の増大や最適化手法の改善により、ニューラルネットワークを始めとした機械学習関数は、数多くの情報処理においてその威力を発揮しています。万能表現定理にも裏打ちされた表現能力の豊かさは、画像や音声などの古典的なデータだけでなく、量子多体状態の波動関数を表すのにも効果的であるとの見方が広がり始めています[1]。本講演では、量子多体系の変分波動関数としてのニューラルネットワークを導入し、その特性と応用を紹介します。特に、変分モンテカルロ法を用いた数値実証に関して、基底状態・有限温度状態・非平衡定常状態をはじめとした数多くの事例において、最先端の精度でのシミュレーションを可能にしている例を紹介したのち[2, 3, 4]、今後の研究の展望に関して述べます。 [1] G. Carleo and M. Troyer, *Science* 355, 602 (2017). [2] NY and R. Hamazaki, *Phys. Rev. B* 99, 214306 (2019). [3] NY, W. Mizukami, F. Nori, *Commun. Phys.* 4 106 (2021). [4] Y. Nomura*, NY*, F. Nori, *Phys. Rev. Lett.* 127, 060601 (2021).