

# 精密N体問題への挑戦と 量子アニーリングの可能性

KEK計算科学センター  
青山茂義

主な内容

- ・ 確率的分変法
- ・ 量子アニーリング
- ・ 量子機械学習的分変法

原子核・原子分子・計算科学分野連携で行いたいこと：

# 精密N体系解の基礎技術プラットフォームの構築

これまで、多体系計算法は、  
独立してそれぞれの計算可能な数の  
領域で研究を実施。

それぞれの計算法を  
接続して、 $N=10\sim 100$ まで  
計算法を実施するような  
プラットフォーム構築

精密N体計算

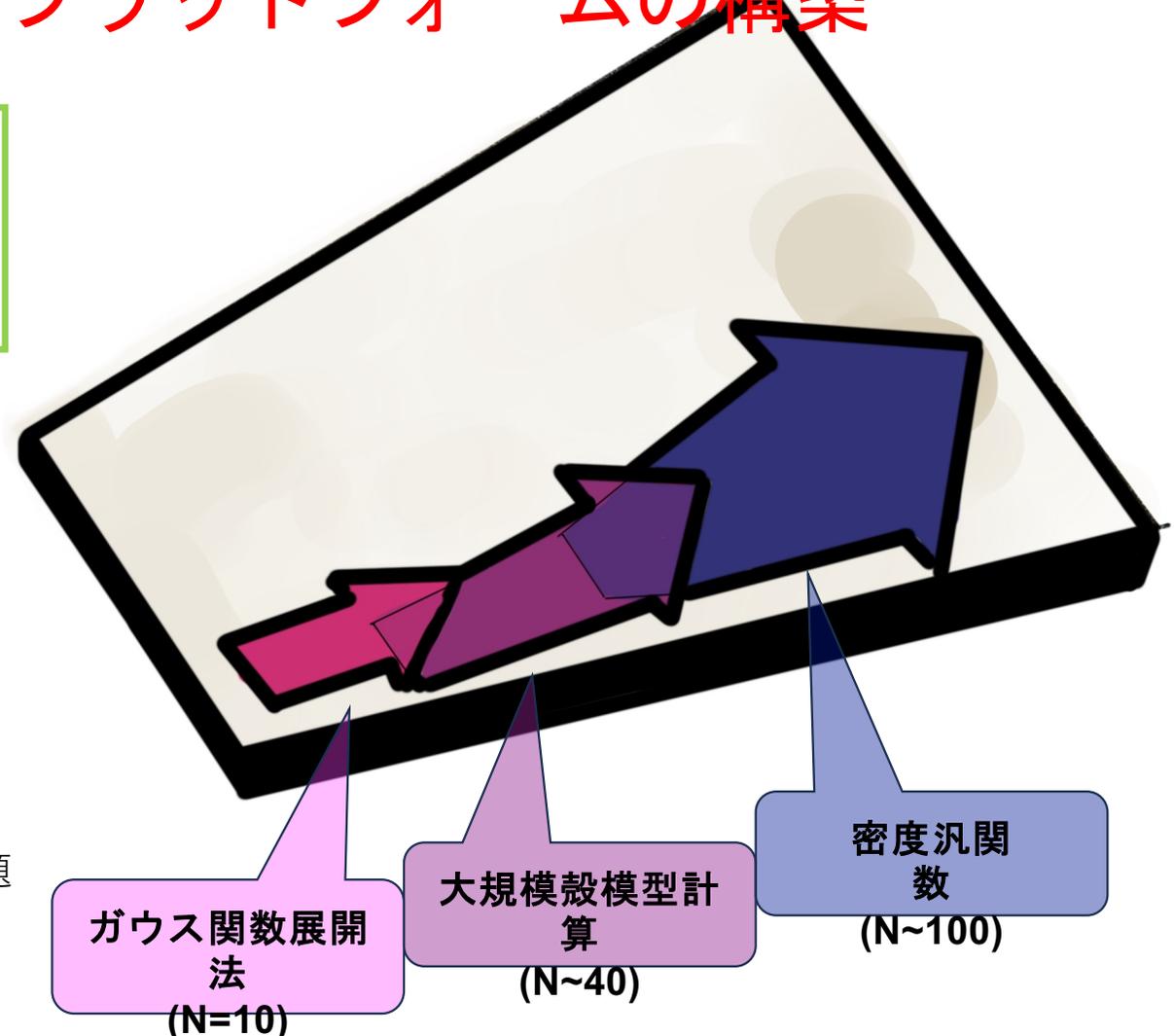
Faddeev Method: 5体問題まで（同種粒子）

Stochastic Variational Method: 6体問題まで

Non-core shell model: 10体問題くらいまで

Green Functional Monte Carlo method: 12体問題

ガウス関数展開法: 5体問題（共鳴、束縛）



# Brink型ガウス基底

ローカルガウス関数を反対称化し、角運動量射影したもの

$$\Phi_{JM}^{\pi} = \sum_{j=1}^N c_j P_{JM} P^{\pi} \Psi_j$$

$$\Psi(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_A) = \mathcal{A}[\psi_1 \psi_2 \cdots \psi_A]$$

$$\psi_j = \phi_j s_j \tau_j$$

$$\phi_i(\vec{r}) = A \exp[-(\vec{r} - \vec{R}_i)^2 / 2b^2]$$

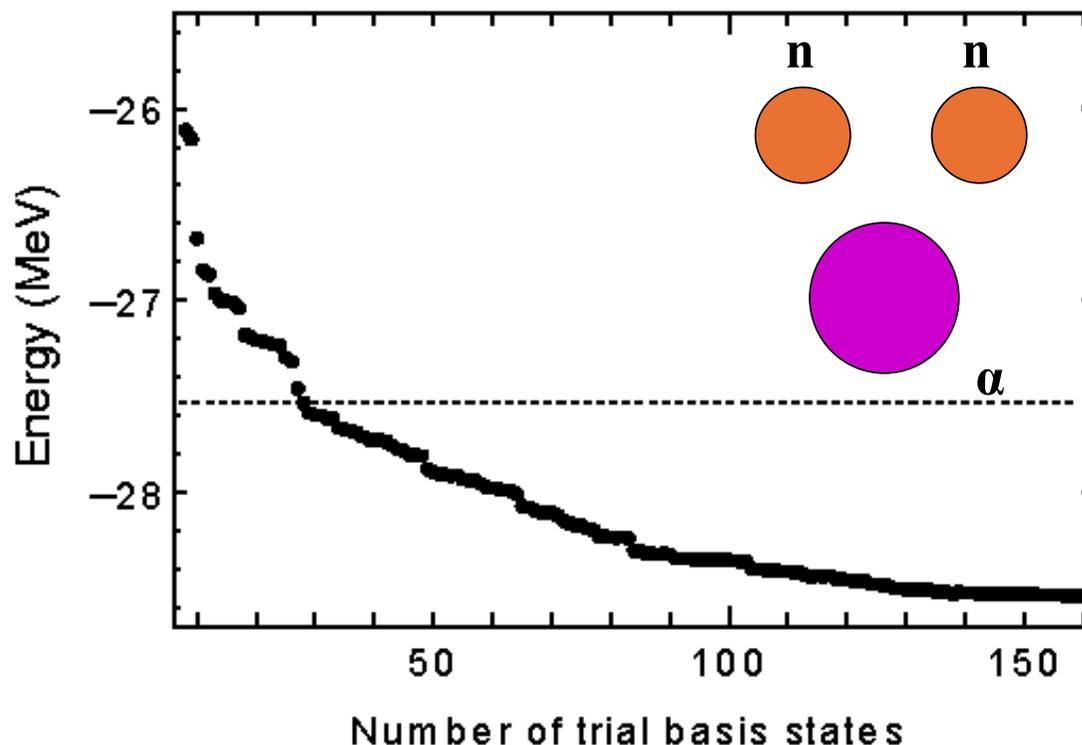
(生成座標R が実数の場合はBrink型、AMD型)

## 確率論的変分法 (SVM)

K. Varga, Y. Suzuki, Y. Ohbayashi, Phys. Rev. C50, 189 (1994)

1. 各粒子 $i$ のガウス中心パラメータ $R_i$  を乱数で発生させて、基底関数を生成する。
2. この基底関数を足してエネルギー固有値を求めて、エネルギーが下がったら基底関数として採用する。下がらなかつたら、破棄する。
3. 1に戻る。

# The energy convergence of the ground state(0+) of ${}^6\text{He}$



1000程度の基底関数が必要な所、30程度の基底関数で収束する。

行列  $10^6 \rightarrow 10^3$

使用メモリの大幅縮小が可能

**Volkov No.2 (M=0.6, B=H=0.125) +G3RS  $b=1.46\text{fm}$**

$$V(r) = (W - MP^\sigma P^\tau + BP^\sigma - HP^\tau) \times (V_1 \exp(-r^2/c_1^2) + V_2 \exp(-r^2/c_2^2)), \quad W = 1 - M, M = 0.60 \text{ and } B = H = 0.125$$

$$V_{ls} = V_0 \{e^{-d_1 r^2} - e^{-d_2 r^2}\} P(^3O) \vec{L} \cdot \vec{S}, \quad d_1 = 5.0 \text{ fm}^{-2}, d_2 = 2.778 \text{ fm}^{-2}, V_0 = 2000 \text{ MeV}.$$

## ${}^6\text{He}$ and ${}^{12}\text{C}$ (三体模型)

${}^6\text{He}$  SVM(AMD+GCM)  
 **$E = -28.56\text{MeV}$**

${}^{12}\text{C}$   **$E = -89.62\text{MeV}$**   
PRC68(2003)

既存の3体計算

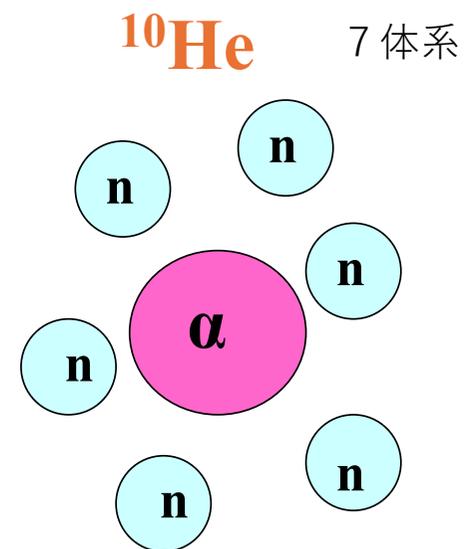
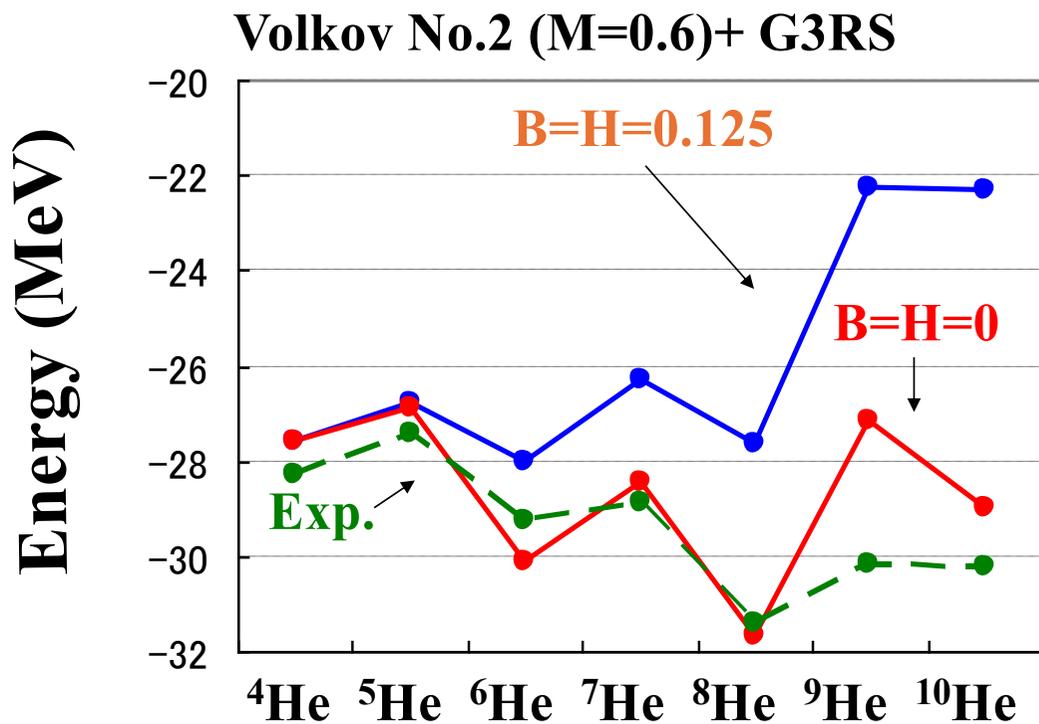
RGM  
 **$E = -28.34\text{MeV}$**   
Arai

**$E = -89.4\text{MeV}$**   
Kamimura, NPA351, 456(1981)

**$E = -89.62\text{MeV}$**   
Matsumura and Suzuki, NPA739, 238(2004)

**$E = -89.57\text{MeV}$  (GCM)**  
Funaki, Thosaki, Horiuchi, Schuck, Ropke,  
PRC67, 051306(2003)

## Calculated Energies for He-isotopes



1 CPU(コア)で数週間の計算

# 並列化デザイン1(MPI+OpenMP)

各行列要素では、ローカルガウスの基底関数を角運動量の固有状態にするために角運動量射影(オイラー積分)を行っている。

オイラー角  $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$ の三重積分

例)  $20 \times 20 \times 20 = 4000$

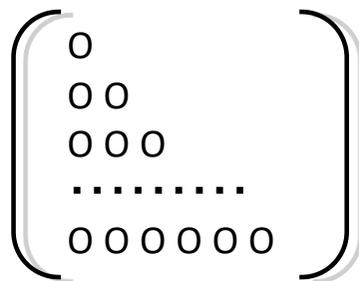
一つの行列要素を計算するには、4000個のほぼ同計算コストの独立計算可能な $\langle R(\Omega) \rangle$ を足しあわせる。

=>並列化に向いている。

=>各ノードでは一つの行列要素の計算をOpenMPで並列化する。

## 一桁スピードアップ

## 並列化デザイン2(MPI+OpenMP)



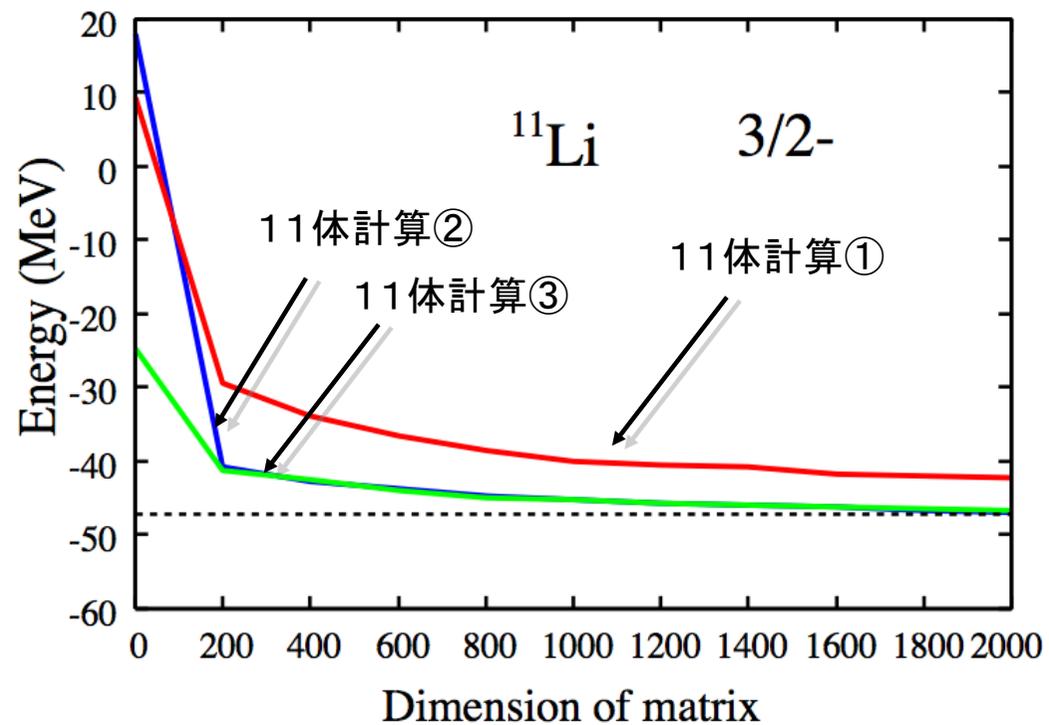
$N \times N$ 行列の独立な $N(N+1)/2$ 個の行列要素の計算をする  
が、変分パラメータの違いなのでこれらも基本的に同計算  
コストである。

=> 並列化に向いている。

=> MPI並列化により、各ノードに分配する。

数10ノードを使えば、  
1桁スピードアップ

## Energy convergence for 11-body calculation

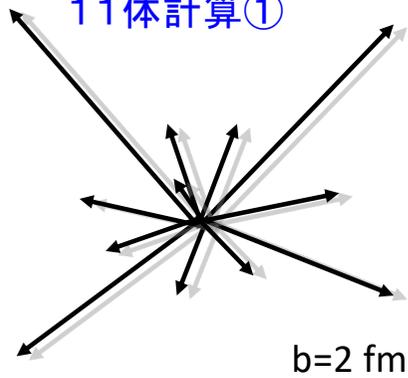


①、②、③は、乱数によるベース発生方法 (GMCB) の違い

Hybrid 並列

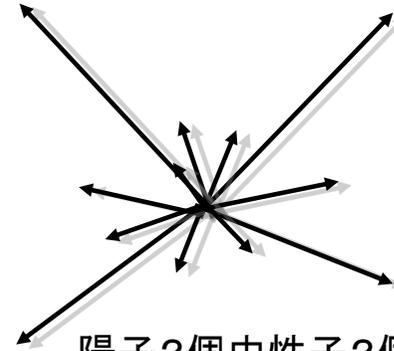
# GMCB for 11 body system

11体計算①



11体計算②

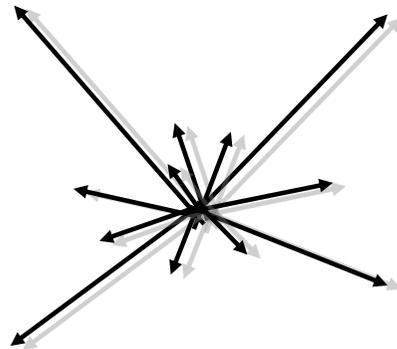
( $\alpha$ +過剰核子の8体模型的)



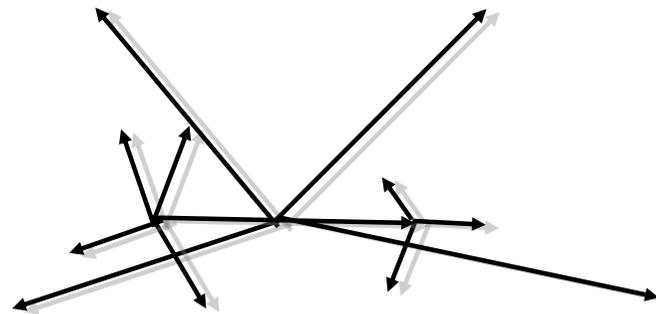
陽子2個中性子2個は、 $b=0.1 \text{ fm}$   
その他の7核子は、 $b=2 \text{ fm}$

11体計算③

( $\{\alpha$ +過剰核子の8体模型} $\}&\{\alpha+t+n+n+n+n$ の6体模型}カップルチャネル的)



&



陽子2個中性子2個は、 $b=0.1 \text{ fm}$   
陽子2個中性子1個は、 $b=0.1 \text{ fm}$   
 $\alpha+t$ 間は、 $b=2 \text{ fm}$   
その他の4核子は、 $b=2 \text{ fm}$

乱数発生 of ウェイト  
 $\exp(-r^2/b^2)$

# 量子コンピュータ

## • 量子ゲート方式

- 量子ビットで量子回路を組む方式
- 汎用性が高い（量子系シミュレーションに期待）
- IBM Quantum が利用可能



IBM quantum one

## • 量子アニーリング方式

- イジング模型の基底状態（エネルギー最小状態）を利用
- 組み合わせ最適化問題，サンプリング，相関などに特化
- D-Wave マシンが利用可能

5000量子ビット以上



D-Wave Advantage



# イジング模型の概略

Hamiltonian

全体的なエネルギー

$$H(\vec{\sigma}) = - \sum_{i < j} J_{ij} \vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_j - \sum_{j=1}^N h_j \vec{\sigma}_j$$

局所的な磁場のエネルギー

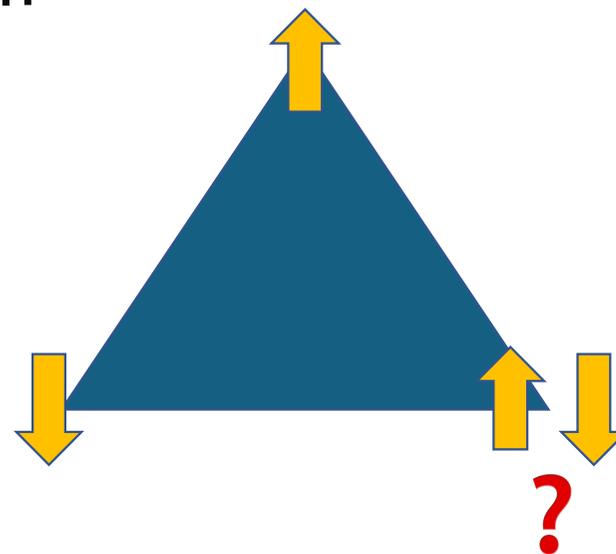
スピン上 下  
 $\vec{\sigma}_j = 1 \text{ or } -1$

$\vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_j = 1 \text{ or } -1$

**$J_{ij}$ : 係数 (スピンの向きを決める)**

**$J_{ij} > 0$  強磁性体**

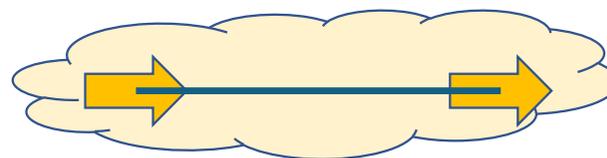
**$J_{ij} < 0$  半強磁性体**



## 重ね合わせの状態



(横磁場)



(横磁場を取り除いて)観測

$$|11\rangle + |1-1\rangle + |-11\rangle + |-1-1\rangle$$

重ね合わせの状態を用いると、  
超並列計算が可能になる

# コスト関数

$$E(\mathbf{z}) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N Q_{ij} z_i z_j$$

QUBO (イジング模型のスピンの相関ハミルトニアンに対応)

$$z = (x+1)/2$$

spin

コスト関数を最小にするようなバイナリ変数の組み合わせ (QUBO) は?

0 or 1 のバイナリ変数

QUBO: Quadratic Unconstrained Binary Optimization  
(2次制約無し2値最適化問題)

# 頻出ワード (ベスト30)

ユーザからの問い合わせメール664通の中から形態素分析で抜き出した。

'設定': 447	'メールアドレス': 161
'メール': 429	'アドレス': 149
'アカウント': 391	'Zoom': 147
'パスワード': 351	'ccメール': 141
'システム': 339	'容量': 132
'ログイン': 296	'入力': 128
'小金井': 280	'工学': 127
'府中': 238	'ネットワーク': 124
'接続': 238	'申請': 122
'認証': 235	'工学部': 121
'TUAT-ID': 225	'農学部': 118
'変更': 201	'アクセス': 114
'多要素認証': 189	'管理': 114
'番号': 178	'号館': 113
'送信': 166	'手続き': 110



論文

## 量子アニーリングによる ICT 問い合わせメールの 単語間相関分析へのボルツマン機械学習の適用

青山 茂義<sup>✉</sup>, 長島 和平<sup>✉</sup>, 根本 貴弘<sup>✉</sup>

東京農工大学総合情報メディアセンター

### Application of Quantum Boltzmann Machine Learning to Word-to-Word Correlation Analysis in ICT Inquiry Email

Shigeyoshi Aoyama, Kazuhei Nagashima, Takahiro Nemoto

Information Media Center, Tokyo University of Agriculture and Technology

**概要:** 近年、AIや機械学習技術の急速な発展により、生成AI、チャットボットやAIスピーカなど、人間生活をサポートするための情報技術の進展が著しい。また、最近では、量子コンピュータの開発の進展が、更にAIや機械学習の処理性能を加速させていく情報技術の一つとして大きく期待されている。その中でも、量子アニーリングマシンは、古典コンピュータよりも組合せ最適化問題等を高速に解く量子コンピュータとして注目を浴びている。また、既に、D-Wave システム社により実装されており、年々、着実に性能をあげて、5000量子ビット程度のもも実用化されている。大学の情報系センターにおいても、サイバーセキュリティ攻撃やインシデントの分析、ネットワークのログ分析、ネットワーク機器配置の最適化など、量子アニーリングマシンの適用により高速な分析が可能になるものが多数ある。本研究では、その中から、ユーザの問い合わせメールの分析を視野に、量子アニーリングマシンの適用可能性について検討し、その適用事例として問い合わせメール内の頻出単語間の相関を量子機械学習により分析する。

**キーワード:** 問い合わせメール、機械学習、量子アニーリング、量子コンピュータ

## 頻出ワード (ベスト30)

'設定': 447	'メールアドレス': 161
'メール': 429	'アドレス': 149
'アカウント': 391	'Zoom': 147
'パスワード': 351	'ccメール': 141
'システム': 339	'容量': 132
'ログイン': 296	'入力': 128
'小金井': 280	'工学': 127
'府中': 238	'ネットワーク': 124
'接続': 238	'申請': 122
'認証': 235	'工学部': 121
'TUAT-ID': 225	'農学部': 118
'変更': 201	'アクセス': 114
'多要素認証': 189	'管理': 114
'番号': 178	'号館': 113
'送信': 166	'手続き': 110

# 頻出 30 単語のバイナリ表示

例)

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
メール 1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1
メール 2	0	0	0	1	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1	0	0	0	0,	0	0	0	0	0	0	0
メール 3	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1

メールの中にある頻出単語が入っていたら, 1

# 量子ボルツマン機械学習

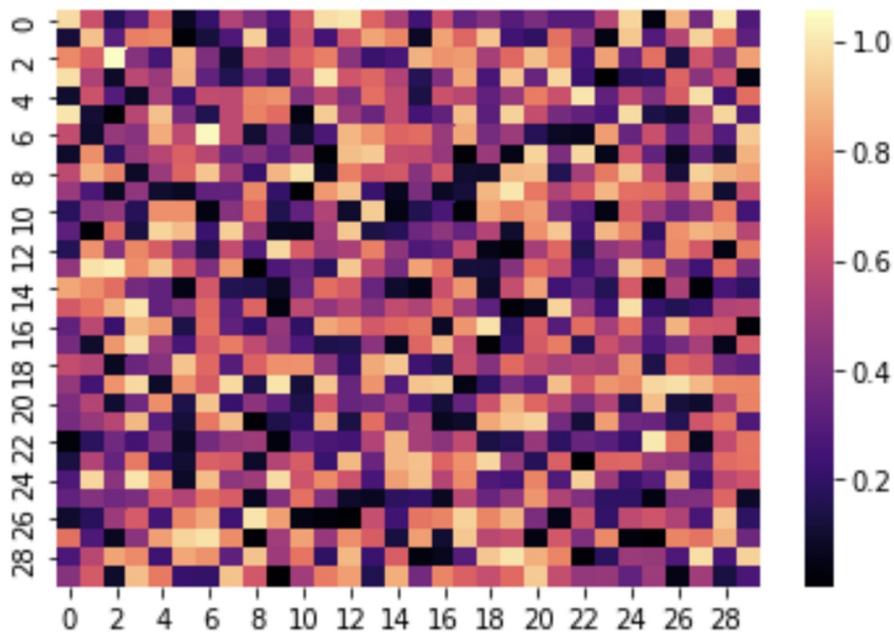
実際の間い合わせメール (664通)      量子アニーリングでのサンプリング (今回の計算では100回)

$$Q_{ij}^{(l+1)} = Q_{ij}^{(l)} + \alpha \left( \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N Z_{ki} Z_{kj} - \frac{1}{N'} \sum_{k=1}^{N'} a_{ki} a_{kj} \right)$$

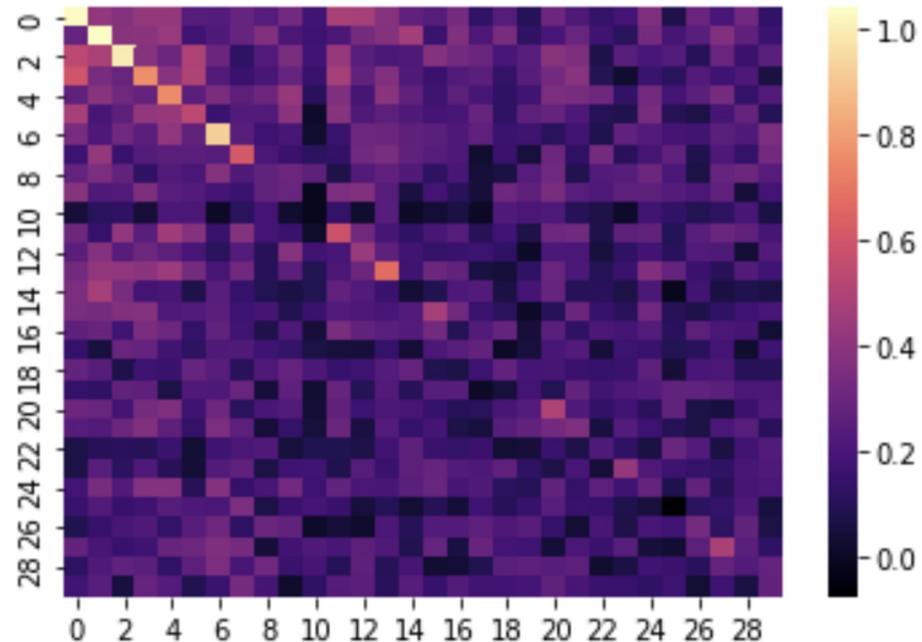
$\alpha$  勾配係数

*Ricardo Baptista, Matthias Poloczek ,  
Proceeding of Machine Learning  
Research, Vol80 (2018)*

# QUBO行列の量子機械学習の結果(50回)



0 回

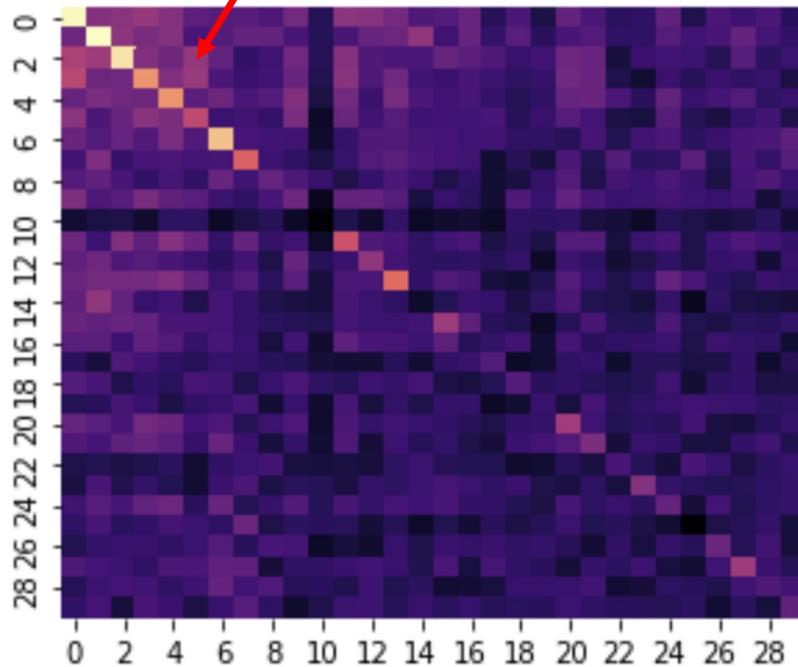


50回

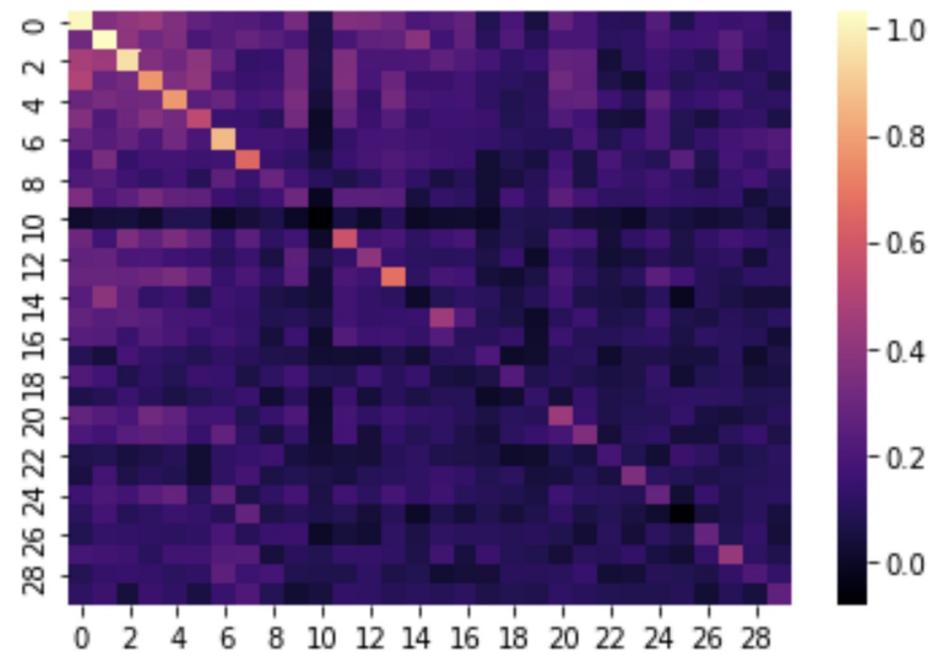
$$Q_{ij}^{(l+1)} = Q_{ij}^{(l)} + \alpha \left( \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N Z_{ki} Z_{kj} - \frac{1}{N'} \sum_{k=1}^{N'} a_{ki} a_{kj} \right)$$

# QUBO行列の量子機械学習の結果(100回, 150回)

例 “アカウント” と “ログイン” の相関が強い



100回



150回

# 量子ブラックボックス最適化（教師あり）

例) 10個の基底関数でエネルギー最小となる組み合わせを考える。

1. 100個の基底関数候補を乱数で作る。
2. 適当に10個選んで基底関数の候補をバイナリ変数(0100100・・・01001)で表現する。

  
100個のバイナリ変数 $Z_i$

3. 幾つかの候補に対して、行列要素の計算コードで実際にエネルギーを計算して、最適な基底関数の組み合わせの候補を提案するQUBO（代理関数）を作成する。
4. 提案されたその基底関数のエネルギーの低いもの幾つかで実際に行列要素を計算する。

（アイデア）確率的変分法の乱数で基底関数を提案していた部分を、機械学習による基底関数の提案に置き換える。

（量子）機械学習的変分法

# 量子・古典ハイブリッド計算

スーパーコンピューター  
(古典)



①追加する基底関数は何がいいですか？

量子計算

②この基底関数はどうですか？

古典数値計算

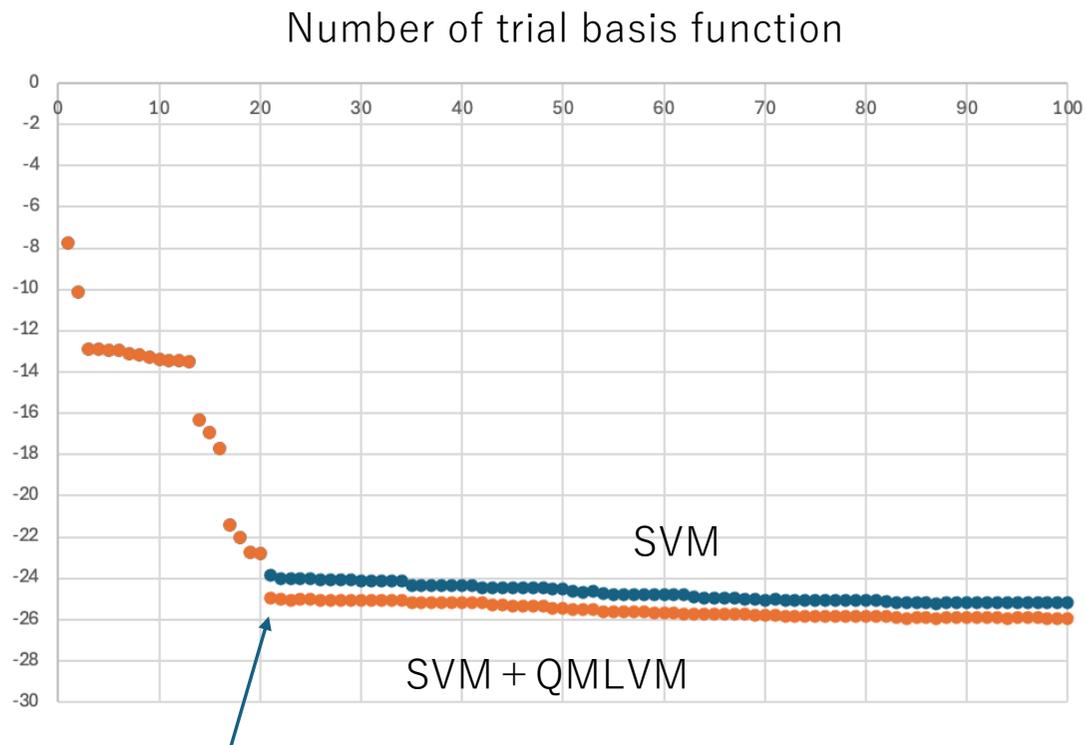
③エネルギー下がったので、O.K.です。  
or エネルギー変わらないので、N.G.です。

必要に応じてQUBO修正して、①に戻る。

量子アニーリング  
コンピュータ



# Energy convergence of ${}^6\text{He}$ (6-body)



20回目だけ量子アニーリングコンピュータが試行関数を提案

# まとめ

1. Brink型波動関数にSVMを適用することにより、7体系程度は可能
2. 更に、Hybrid並列で計算能力を向上させることにより、10体系程度も可能

(問題点) 完全乱数だと、基底関数の生成が非効率

3. 量子アニーリングコンピュータで基底関数を組み合わせ最適化問題として求める手法の提案

(注意)

- ・相互作用が簡単
- ・粒子を1つのローカルガウスで表現
- ・行列要素は数値積分で計算しているため解析的手法よりも誤差が大きい