



橋本 省二  
(高エネルギー加速器研究機構・  
素粒子原子核研究所・教授)

## 課題名： シミュレーションでせまる基礎科学：量子新時代へのアプローチ

### 概要・目標

- ◆ 素粒子原子核から物性にわたる大規模連携で、強い相関をもつ量子多体系に関わる基礎科学の重要課題にチャレンジ。
- ◆ データ科学や高度な数学にもとづく新手法を導入。量子コンピュータのためのアルゴリズム開発も含め量子新時代に対応。

### 実施体制・関係機関・研究内容

#### サブ課題A:原子核から高温超伝導にわたる量子多体計算

慶応大,筑波大,早稲田大

- 強相関電子系の基底状態がもつ強い量子もつれを表現するために機会学習の手法を導入
- 原子核の計算にも応用。量子相転移などを探求
- 国際協力で計算手法のベンチマーク作成

#### サブ課題B:量子色力学のMCMCシミュレーション

KEK,  
理研,  
阪大  
大阪国際

- B中間子崩壊において包括的崩壊を扱う新手法
- HALQCD法をエキゾチック粒子の研究に応用
- カイラル対称性をもつ格子QCD定式化で有限温度相転移をシミュレーション
- 自己学習モンテカルロを応用したアルゴリズム

#### サブ課題C:革新的新手法による負符号問題をもつ系の第一原理計算

KEK,京大

- 負符号問題はモンテカルロ法における未解決問題
- 解析性を利用した新手法による量子多体系の相構造の解明
- 複素化したランジュバン法で有限密度QCDの研究

#### サブ課題D:富岳による量子計算シミュレーション

- 世界最大規模の量子計算シミュレーション
- 変分量子固有値解法の効率化

理研

#### 分野横断等

- 大規模実験やQ-LEAPとの連携; 広報

順天堂大

### 想定される具体的成果の例

- ◆ 負符号問題をもつフェルミオン系で代表的なハバードモデルで第一原理計算を実現
- ◆ 最大46量子ビットの量子計算シミュレーションを実現