

課題名(タイトル):

二次元強相関係の量子ダイナミクスの研究

利用者氏名: ○曾田繁利

理研における所属研究室名: 計算科学研究センター 量子系物質科学研究チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

強相関電子系は電子間の強いクーロン相互作用により独自の集団の量子効果を示す。このような強相関電子系の理論的研究においては、平均場近似の基づく解析的理論の適用は困難であるため、数値計算による研究が重要であると考えられている。また、強相関電子系の数値的取り扱いでは、系のサイズに対しその内部自由度が指数関数的に増大するため、数値的厳密な手法による取り扱いでは取り扱う系のサイズに対して強い制限がかかる。系のサイズによらない普遍的な性質を明らかにするため、数値的厳密な手法における取り扱い可能な系のサイズの限界を超えた手法も開発されている。このような手法のひとつとして、密度行列繰り込み群(DMRG)法が知られている。この DMRG 法は特に一次元的な電子構造を持つ強相関系に対して非常に有効な方法である。その一方、多次元の強相関系に対しては、その計算精度を保つために必要とされる計算コストが非常に大きくなるため、適用が困難となる。この事情はエンタングルメント・エントロピーの面積則に対応している。しかしながら、近年の計算機科学の発展は、この DMRG 法の二次元強相関系への適用を十分可能にしており、実際、多くの研究成果も報告されている。さらに、HOKUSAI をはじめとした最新の大規模計算機を利用した場合には、基底状態のみではなく量子ダイナミクスの計算にも適用可能である。そこで、本研究課題においては、HOKUSAI をはじめとした大規模計算機を効率的に利用可能な大規模並列 DMRG 法プログラムを開発し、開発したプログラムによる強相関系の量子ダイナミクスを明らかにすることを目的とする。また、開発された大規模並列プログラムは広く一般に公開され、HPCI 一般利用課題をはじめとした数多くのプロジェクトで利用され、その研究成果も論文等で報告している。

2. 具体的な利用内容、計算方法

DMRG 法は、計算の目的となる物理量に対応したターゲット状態を任意の数 m の基底で適切に表現することでその計算を実行する。このターゲット状態は、例えば基底状態の計算であれば基底状態がターゲット状態となる。また、励

起ダイナミクスを計算する動的 DMRG 法の場合は対応する励起状態を同時に取り扱うことができるようマルチ・ターゲットで計算が実行される。また、任意の数 m は求める計算精度、また利用する計算資源により決定される。特に多次元系への DMRG 法の適用ではこの m が非常に巨大となるため、必要とする計算資源が巨大となる。ただし、密度行列繰り込み群法は、例えば量子モンテカルロ法で幾何学的フラストレーション等のため負符号問題が発生する系に対しても適用可能であるため、密度行列繰り込み群法の多次元系への適用による研究は現在も盛んに行われている。そこで本研究課題では、大規模計算機による DMRG 法を適用した二次元強相関系の研究を行うため、その大規模並列プログラムの開発、および量子ダイナミクス等の研究を可能にするための拡張を行ってきた。本年度の利用としては、これまでに開発した大規模並列 DMRG 法の量子計算シミュレーションへの拡張をその中心課題として取り扱った。この拡張では、これまでの量子スピン系のダイナミクス研究に向けた動的 DMRG 法、および時間依存 DMRG 法を基本としている。

3. 結果

開発された量子計算シミュレータを用いて、量子アニーラ「D-Wave」との比較と計算の検証を行った。量子アニーリングは組み合わせ最適化問題に特化した量子コンピュータであり、求める組み合わせ最適化問題をマッピングした Ising 模型の基底状態を得ることでその答えが得られる。量子力学的効果として横磁場を導入し、その横磁場を断熱的に「アニーリング」することにより目的とする Ising 模型の基底状態が得られる。本研究では、このような横磁場のアニーリングを模倣した DMRG 法として、DMRG 法でターゲット状態に対応した基底の最適化の過程で用いられる有限系アルゴリズムについてその最適化毎に横磁場を徐々に小さくし最終的にゼロとする DMRG 法のアルゴリズムを開発し、実際にこの手法をこれまでに開発した大規模並列 DMRG 法プログラムに実装した。また、本手法を検証するため、ランダムな ZZ 相互作用と Z 方向の磁場で与えられる Ising 模型について、D-Wave による結果との比較を行った。本研究

では最大で 2000 qubits を超える大きさの系を D-Wave で採用されているキメラグラフに対応した形状で取り扱う必要があるため、巨大な計算資源が要求されることが予想される。本研究による DMRG 法と D-Wave との比較では、比較的小規模の系では両者同じエネルギーの結果が得られること、また 384 qubits を超えるサイズの系では DMRG 法による結果の方がより低いエネルギーの結果が得られることが確認された。また、実際に必要とされる計算資源については、 $m=16$ と DMRG 法の適用としては非常に小さな m を適用した場合でも 2000 qubits を超えるサイズの系で D-Wave よりも低いエネルギーの結果を本研究で開発された DMRG 法で得られることが確認されたため、効率的な適用が可能であると考えられる。D-Wave との比較した場合の長所と短所をまとめると、本研究で開発した DMRG と比較して D-Wave は、圧倒的に早い時間で結果を返すことが可能であるため、最適ではなくても比較的良い結果で十分な多くの応用では D-Wave の利用がより効率的であると考えられる。その一方、より最適な解を求める場合、また本研究で開発した DMRG 法の場合では全結合も含めた適用が可能であるため、より精密、また複雑で大規模な問題に対しては本研究で開発した DMRG 法の適用も期待できると考えられる。また、ハードウェア開発に資するシミュレータとして時間依存 DMRG 法によるシミュレーション、また動的 DMRG 法による励起状態の計算なども可能であるため、このような応用に対してもその利用が期待される。

4. まとめ

本年度の本研究では、これまでに開発した大規模並列 DMRG 法を基に量子アニーリングに対応したアルゴリズムを開発・実装し、D-Wave との比較・検証を行った。本研究で得られた DMRG 法による結果は、比較的小規模な系に対しては D-Wave と同等、またより大きな系に対しては D-Wave より低いエネルギーの結果が得られることが確認された。また、比較的小さな m での計算でも良い結果が得られるため、効率的な実行が可能である。また、ハードウェア開発に資するシミュレータとしての利用も可能である。

5. 今後の計画・展望

今後の計画・展望としては、DMRG 法によるゲート式量子コンピュータのシミュレータとしての拡張を予定している。また、これまでに開発した大規模並列 DMRG 法は強相関係のダイナミクスを明らかにすることを目的としたプロジェクト

での利用も予定されており、今後も引き続き強相関係のダイナミクスに対する研究を実施する予定である。

2020年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

- B. H. Kim, S. Sota, T. Shirakawa, S. Yunoki, Y. W. Son, “Proximate Kitaev system for an intermediate magnetic phase in in-plane magnetic fields”, *Phys. Rev. B* **102**, 140402 (1-5) (Rapid Communication) (2020).
- T. Tohyama, S. Sota, S. Yunoki, “Spin dynamics in the t - t' - J model: Dynamical density-matrix renormalization group study”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **89**, 124709 (1-7) (2020).
- K. Shinjo, S. Sota, T. Tohyama, “The effect of phase string on single-hole dynamics in two-leg Hubbard ladder”, *Phys. Rev. B* **103**, 035141 (1-12) (2021).

【口頭発表】

- 曾田繁利, 柚木清司, “密度行列繰り込み群法によるランダムな Ising 模型の計算手法と D-Wave との比較”, 日本物理学会 2020 年秋季大会, 10pL2-10, 2020 年 9 月 10 日, オンライン.
- 新城一矢, 曾田繁利, 遠山貴己, “時間依存密度行列繰り込み群法による梯子格子拡張ハバード模型の光学応答の研究”, 2020 年秋季大会, 11aL3-3, 2020 年 9 月 11 日, オンライン.
- 曾田繁利, “Research and development for quantum dynamics simulation by quantum computer”, JST さきがけ「量子情報処理」領域第 3 回領域会議, 2020 年 12 月 19 日, オンライン.
- 新城一矢, 玉城善貴, 曾田繁利, 遠山貴己, “二次元拡張ハバード模型の光学伝導度の時間依存密度行列繰り込み群法による研究”, 日本物理学会第 76 回年次大会, 2020 年 3 月 12 日, オンライン.