

プロジェクト名(タイトル):

テンソルネットワーク法による多体模型の解析

利用者氏名:

○上田 宏(1)

理研における所属研究室名:

(1)開拓研究本部 柚木計算物性物理研究室

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

現実の物質における諸性質を説明しうる多体模型の解析は、計算物理の分野において常に重要視されている。多体模型の解析手法として、近年、行列積状態に端を発したテンソルネットワーク法が注目を浴びており、多様な多体模型の低エネルギー物理の理解に役立っている。

本研究課題では、テンソルネットワーク法の高度化、ならびに、それらを利用して物性・統計・量子情報物理の理解に資する多体模型の解析を行う。実際の物理を説明しうる有効多体模型では、複数の相互作用変数を持つことが多々あり、それらの包括的な調査を効率的に実施するためにスーパーコンピュータの利用が必須となる。

2.

3. 具体的な利用内容、計算方法

本年度は、テンソルネットワークとの関連性も深く、近年の量子計算機(実機)の開発及び実機の自由度を活用した新奇量子アルゴリズムの発展に資するために下記の2つのテーマについて主に取り組んだ:

[量子アルゴリズムに触発された手法論による全結合型ランダムイジングモデルの低エネルギー状態解析 (以下※1)]

当該模型の基底状態を探索する解法の高度化は、組合せ最適化問題などの具体的な社会問題が実装された系の最適解を得る上で常に求められている。本問題は、一般にNP困難となるため、良いヒューリスティクスは知られているものの問題規模が大きくなると、既存の計算機の自由度で取り扱いが困難になってしまう。そのため、量子力学的な状態遷移や量子ダイナミクスを活用して当該問題を高速に解こうとする試みが近年注目を集めている。本研究では、オリジナルのイジング模型と非可換な無限小の量子力学的相互作用を問題の背景に用意し、クリロフ部分空間法のアイデアに立脚して、遷移状態の生成と自由度の打ち切りをくり開始実行することで、オリジナルのモデルの低エネルギー状態&エネルギーを推定するアルゴリズムの開発と実証を行った。

[飽和磁化近傍の物理解析に特化した量子スピンシミュレータ QS^3 の開発と応用 (以下※2)]

1000 量子ビット級超の実機の結果の信憑性を確かめるためには、既存の計算機において同程度の量子ビットを取り扱える問題設定を用意して、厳密な参照データを用意しておくことが必要不可欠である。そこで本研究では、粒子数が保存する量子スピン系の飽和磁化近傍のシミュレーションに特化した量子スピンソルバー (QS^3) を構築し、物性・統計物理的に意味のある問題設定で上記目的に資する参照データを与えることが可能な環境を用意する。具体的には、クリロフ部分空間法を活用した数値対角化、二点相関関数の評価、連分数展開法を用いた動的構造因子、任意の2点ユニタリ演算子による量子状態の遷移、任意の分割下でのエンタングルメントエントロピーの評価等を行えるソルバーの開発を行った。

4. 結果

[※1] 1体及び2体のXX相互作用を無限小導入するケースを採用して、全結合型ランダムイジング相互作用+ランダム縦磁場模型の低エネルギー状態の探索を $N=600$ サイトまで実施した。基底状態の探索に関しては従来法との一致を得るとともに、その問題規模までのタイム・トゥ・ソリューションが N^5 に概ね比例することを見出した。

[※2] 高いOpenMP並列化効率を有するソルバーの開発に成功し、 10^3 サイトの立方格子上の飽和磁場直下にあるハイゼンベルグ模型の励起スペクトルなどを得ることに成功した。また、粒子数が保存するランダム量子回路上でのエンタングルメントエントロピーの評価なども実行可能にした。

5. まとめと今後の計画・展望

[※1]、[※2]を通じて量子実機のシミュレーションに資するアルゴリズムを提案することができた。特に QS^3 は今後ボソン系、フェルミオン系、より一般的な量子回路系への拡張が期待できる。また、よりテンソルネットワークとの関連を深めて、物性・統計物理の問題を実機の自由度を活用して効率よくシミュレーションできる戦略を継続して構築する。

2021 年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

[1] Hiroshi Ueda, Yuichi Otsuka, and Seiji Yunoki, “Quantum-inspired search method for low-energy states of classical Ising Hamiltonians”, arXiv:2010.00180v2 (2021) [13 pages], to be published in J. Phys. Soc. Jpn. (2022).

【口頭発表】

[2] 上田宏, “テンソルネットワークによる量子状態圧縮技術の高度化”, さきがけ「革新的な量子情報 処理技術基盤の創出」研究領域 第 4 回領域会議 2021 年 5 月 28 日, オンライン.

[3] 上田宏, 下川統久朗, “量子スピソルバー-QS³を用いた量子回路シミュレーション”, 日本物理学会 2021 年秋季大会, 2021 年 9 月 23 日, オンライン.

[4] 上田宏, “テンソルネットワークによる量子状態圧縮技術の高度化”, さきがけ「革新的な量子情報 処理技術基盤の創出」研究領域 第 5 回領域会議 2021 年 11 月 26 日, オンライン.

[5] 上田宏, “Development of quantum spin solver QS3 and its application”, 近畿大学総合理工学研究科学際セミナー, 2021/12/01, 近畿大学(オンラインとのハイブリッド). [招待セミナー]

[6] 上田宏, “量子スピソルバー-QS³の高度化”, 第 16 回量子スピン研究会, 2021/12/17, オンライン.

[7] 上田宏, 下川統久朗, 「量子スピソルバー-QS³の高度化:混合スピン・超格子系への応用」, 日本物理学会第 77 回年次大会, 2022 年 3 月 15 日, オンライン.