

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. 本プロジェクトの研究の背景、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す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、行列積状態に端を突い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。実際の物理を説明す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. 具体的な利用内容、計算方法

本年度も、昨年度からの継続テーマとして、テンソルネットワークとの関連性も深い近年の量子計算機(実機)の開発及び実機の自由度を活用した量子アルゴリズムの発展に資するため、昨年度開発した量子スピンスルバーQS³(キュー・エス・キューブ)の高度化を展開した。

我々が2021年に公開したQS³は、飽和磁化近傍のスピンス系において数百~千サイト程度の大規模系の厳密対角化計算ならびに動的なスピンス構造因子計算が実行できるユニークなソルバーである。

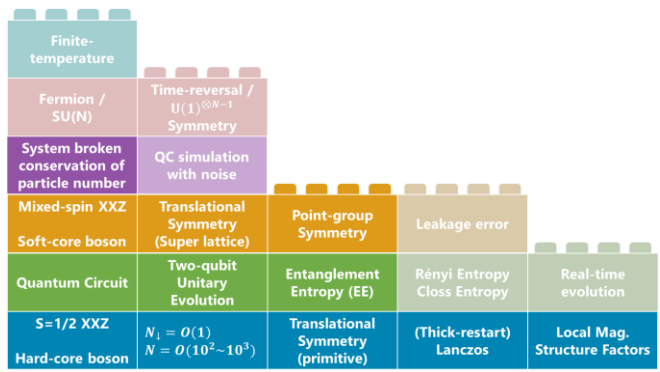


図 1: QS³ の高度化マップ

現在でも図 1 のマップに従ってその高度化が継続的に行われており、量子回路系への応用や、混合スピンス系・超格子系への応用にも応用できる状況であった。今年度は、

QS³ で採用されている希薄なダウンスピン(ボソン)の空間配位と連続する自然数との一対一対応を与える数式をさらに拡張することで、粒子数にカットオフを導入する範囲で粒子数非保存系の解析に資する計算を実行する。具体的な計算として、一次元ハイゼンベルグ鎖に強い縦磁場と弱い一様あるいは交替横磁場を導入し、飽和磁化近傍における横磁化率の推定を試みた。固定化した縦磁場下で、系のサイズを変更しながら最安定な磁化の値を求めておき、弱い横磁場に対する横磁化の値の粒子数カットオフ依存性を議論した。

3. 結果

飽和磁化近傍における横磁化の値は粒子数のカットオフが横磁場ゼロのときに要求される粒子数よりも+1大きな粒子数の空間を取り込むだけで十分議論できることを見出した。当該系における摂動的な交替横磁場に対する横磁化の値は、一様横磁場の値のそれと比較して O(10²) 倍程度の差があることが本アプローチから確認できた。

4. まとめ

今回の高度化によって飽和磁化近傍における XYZ 相互作用、DM 相互作用、横磁場、あるいは粒子数保存則を満たす量子回路系に弱いノイズが導入された系など、これまで QS³ が議論できなかった幅広い量子多体系のシミュレーションへの応用が可能となることを示した。

5. 今後の計画・展望

本年度の計算の延長線上としては、実際に熱力学的極限において自発的対称性の破れを伴う次元量子スピンス系において同様のアプローチを試みる事 2 が考えられる。また上記「4. まとめ」に示すその他の模型群への適用、並びに図1に示した高度化マップに従って、より QS³ の高度化を推し進める予定である。

2022 年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

1. K. Fujii, K. Mizuta, **H. Ueda**, K. Mitarai, W. Mizukami, Y. O. Nakagawa, “Deep Variational Quantum Eigensolver: A Divide-And-Conquer Method for Solving a Larger Problem with Smaller Size Quantum Computers”, PRX Quantum **3**, 010346 (2022) [12 pages].
2. **H. Ueda**, S. Yunoki, T. Shimokawa, “Quantum spin solver near saturation: QS³”, Comput. Phys. Commun. **277**, 108369 (2022) [12 pages].

【口頭発表】

1. **上田 宏**, 「深層変分量子固有値ソルバーの開発と量子スピソ系への応用」, 第 17 回量子スピソ系研究会, 2022 年 4 月 22 日, 沖縄県那覇市.
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 6 回領域会議, 2022 年 5 月 27 日, オンライン.
3. **上田 宏**, 友成未久, 山本大輔, 下川統久朗, 「量子スピソソルバー-QS³ の高度化 II: 粒子数非保存系への応用」, 日本物理学会 2022 年秋季大会, 2022 年 9 月 13 日, 東京都目黒区.
4. **上田 宏**, 山本大輔, 下川統久朗, 「量子計算ソフトウェア QS3 の開発」, 第 7 回量子ソフトウェア研究発表会, 2022 年 10 月 27 日, 大阪府豊中市.
5. **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 7 回領域会議, 2022 年 12 月 12 日, 東京都千代田区.
6. **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「量子情報処理」領域 公開シンポジウム 2022, 2023 年 2 月 2 日, 東京都江東区.