

プロジェクト名(タイトル):量子モンテカルロ法による相関格子模型の研究

利用者氏名:○関和弘(1), 大塚雄一(1,2), 柚木清司(1,2,3,4), Sandro Sorella(2,4)

理研における所属研究室名:

- (1) 量子コンピュータ研究センター量子計算科学研究チーム
- (2) 計算科学研究センター 量子系物質科学研究チーム
- (3) 創発物質科学研究センター 計算量子物性研究チーム
- (4) 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

量子モンテカルロ法は古典コンピュータを用いた量子多体系の計算手法として強力であり、そこでは乱数を用いたサンプリングが重要な役割を果たしている。一方で量子コンピュータの研究開発が進められており、量子コンピュータの活用が期待される潜在的な用途の一つに、量子多体系のシミュレーションがある。本年度は、マイクロカノニカル集団のための量子モンテカルロ法と関連する、ランダム量子回路を用いて量子多体系のマイクロカノニカル集団の熱力学的性質を計算する量子計算手法の研究開発を行なった。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本研究で考えるマイクロカノニカル集団は、標的エネルギー E を中心としてエネルギー窓の幅 δE 程度の広がりを持つガウシアンに応じてエネルギー固有状態の古典混合確率が定まる密度行列により定義される。このマイクロカノニカル集団に対応する熱的純粋状態を考えると、それはランダム量子状態に上述のガウシアン演算子の平方根を作用させたものである。ガウシアン演算子のフーリエ表示を用いることで、この熱的純粋状態はランダム量子状態を時間発展させた状態の時間に関する積分(線型結合)で表現できる。

シミュレーションにおいてコストのかかる部分は、このランダム量子回路により生成したランダム量子状態を時間発展させる部分であり、特にこの部分の計算を HOKUSAI で行なった。ランダム量子状態を生成する部分には対角ユニタリ・デザインに基づく量子回路を用いた。時間発展演算子を生成するハミルトニアンとしては一次元ハイゼンベルグ模型を用い、時間発展演算子は1次の Suzuki-Trotter 分解で近似した。

3. 結果

厳密対角化により得られた結果と開発した手法により得られた結果との比較を行い、統計誤差の範囲での一致を確認した。またサンプル数を固定してランダム量子回路部分

をユニタリ・1 デザインにした場合とユニタリ・2 デザインにした場合に、確かに後者の方が圧倒的に統計誤差を小さくできることを数値的に確認した。また、後者のランダム量子回路を用いることで、統計力学的な手法として期待される通り、標的エネルギー付近の状態数が多いほど(～システムサイズが大きいくほど)統計誤差が小さくできることを数値的に確認した。

4. まとめ

マイクロカノニカル集団のための量子計算手法の研究開発に HOKUSAI を利用した。手法の定式化はマイクロカノニカル集団を表現する純粋状態に基づいており、その状態はランダム量子状態にガウシアン演算子の平方根を作用させた状態である。量子計算を有効活用するためにガウシアン演算子をフーリエ表示し、時間発展演算子の線型結合で表現した。その結果、熱力学量の計算のシミュレーションにおいてコストのかかる部分は、ランダム量子回路を時間発展させる部分となり、ここに HOKUSAI を利用した。本研究の詳細は論文 Phys. Rev. B **106**, 155111 (2022)にまとめた。

5. 今後の計画・展望

提案手法を量子コンピュータ実機で実装することを計画している。

2022年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

1. Kazuhiro Seki and Seiji Yunoki, "Energy-filtered random-phase states as microcanonical thermal pure quantum states", Phys. Rev. B **106**, 155111 (2022).
2. Kazuhiro Seki, Yuichi Otsuka, and Seiji Yunoki, "Gutzwiller wave function on a quantum computer using a discrete Hubbard-Stratonovich transformation", Phys. Rev. B **105**, 155119 (2022).
3. Kazuhiro Seki and Seiji Yunoki, "Spatial, spin, and charge symmetry projections for a Fermi-Hubbard model on a quantum computer", Phys. Rev. A **105**, 032419 (2022).
4. Qing Xie, Kazuhiro Seki, and Seiji Yunoki, "Variational counterdiabatic driving of the Hubbard model for ground-state preparation", Phys. Rev. B **106**, 155153 (2022).

【ポスター発表】

1. Yuichi Otsuka, Kazuhiro Seki and Seiji Yunoki, "Preparing the Gutzwiller wave function on a quantum computer", The 5th R-CCS International Symposium, Kobe Japan, February 2023.