

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、一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、一昨年度に開発した量子スピンソルバー 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ノ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ノ構造因子計算が実行できるユニークなソルバーである。

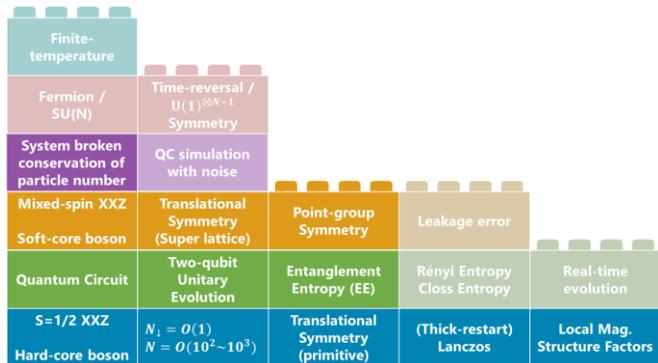


図 1: QS³ の高度化マップ

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、今年度は、適用対象となる量子スピンハミルトニアンを、任意の一体のスピノ項(オンサイトの磁場項)と

2 体のスピノ項(XYZ 項、ジャロシンスキー・守谷項、 Γ 項)からなる模型にまで拡張した。さらに、疎なハミルトニアン of 行列要素を計算機システムの物理メモリが許す範囲で記憶させることで、演算処理の高速化を実現した。

3. 結果

デモンストレーションとして、 $10 \times 10 \times 10$ サイトの立方格子上の $S=1/2$ 反強磁性的ハイゼンベルグ模型において、全磁化が「飽和磁化-3」のセクターかつ波数空間 Γ 点における基底状態計算を計算した。その結果、行列要素を全く保存しない旧 Ver の結果と比較して、今回開発した Ver では約 20 倍計算時間が短縮できることがわかった。(図 2)

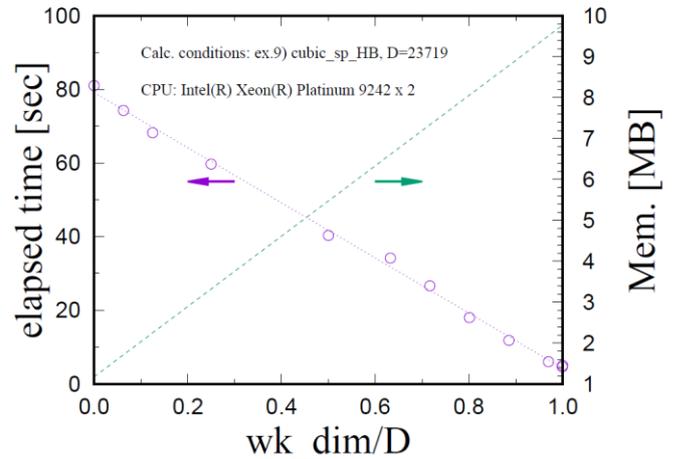


図 2: 記憶する行列要素の割合 vs 計算時間

4. まとめ

今回の高度化によって(オンサイトを除く)任意の 2 次のスピノ演算子からなるハミルトニアンに対して、粒子数のカットオフという制限がある範囲で QS³ を適用できるようになった。これにより、飽和磁化近傍に現れる相構造解析の解析により広い観点からアプローチできるようになっただけでなく、より広い量子回路系のシミュレーションを近似的に(時に厳密に)実行可能となることを示した。

5. 今後の計画・展望

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。

2023年度 利用報告書

2023年度 利用研究成果リスト

【口頭発表】

1. 上田 宏, 「量子計算に対するテンソルネットワーク法の応用」, Tensor Network 2023, 2023年11月15日, 茨城県つくば市. [招待講演]
2. 上田 宏, 「テンソルネットワーク法の量子計算への応用」, 第26回情報論的学習理論ワークショップ, 2023年10月31日, 福岡県北九州市. [招待講演]

【ポスター発表】

3. 上田 宏, 山本大輔, 下川統久朗, 「量子スピソルバー QS^3 の高度化開発」, 日本物理学会 第78回年次大会, 2023年9月17日, 宮城県仙台市.
4. Hiroshi Ueda, Miku Tomonari, Tokuro Shimokawa, Daisuke Yamamoto, “Quantum spin solver QS^3 : Application to spin systems with fictitious symmetry-breaking field”, 2023年8月8日, 東京都文京区

【その他(著書、プレスリリースなど)】

5. 上田 宏, 山本大輔, 下川統久朗, 「機能拡張した QS^3 のリポジトリ公開」, <https://github.com/QS-Cube/ED2>.