

プロジェクト名(タイトル):

大規模並列計算機を用いた強相関量子多体系シミュレーションコードの開発とその応用

利用者氏名:

○白川 知功(1,2,3,4)、Qinfang Zhang(3)

理研における所属研究室名:

(1)計算科学研究センター 量子系物質科学研究チーム

(2)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

(3)開拓研究本部 柚木計算物性物理研究室

(4)数理創造プログラム

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

遷移金属酸化物、希土類-アクチノイドを含むf電子系化合物、および、分子性導体などに代表される物質群の電子状態は、電子が飛び回る項と電子間の相互作用項の両者を重要な役割を果たしていると考えられ、こうした系は量子多体系と呼ばれている。こうした量子多体系のシュレディンガー方程式は量子多体問題と呼ばれ、解析的に解けるケースは稀であり、理論的解明には大規模な数値シミュレーションが大きな役割を果たしてきた。これまでも、第一原理バンド計算、量子モンテカルロ法、繰り込み群法、クラスター近似法など、様々な量子多体問題を解くための方法が考案され、発展してきたが、全ての問題に有効な万能な計算手法というものは現時点ではない。

本課題では、量子多体系を解くための数値計算手法を発展させるとともに、その手法の応用を試みてきた。特に、前年度までに、量子多体系のダイナミクスに関連する計算手法のコード開発や、量子計算機を用いる量子-古典ハイブリッド計算に関する研究も行ってきた。

本年度は、昨年度に引き続き、これまで開発してきた方法の応用研究に加え、テンソルネットワーク法を基にした量子多体問題を解くための量子-古典ハイブリッド計算方法の計算手法開発、および、テンソルネットワーク法をベースとした量子計算のシミュレータ開発を行った。

2. 具体的な利用内容、計算方法

テンソルネットワーク法は、指数関数的に大きな自由度をもつ量子情報を圧縮することで、古典計算機で効率的に計算する方法である。もともと、量子多体問題を解くために発展してきたこの方法は、現在では、ビッグデータの圧縮や機械学習分野でも注目を集めている。テンソルネットワーク

法では、データに依存して、効率的な圧縮が行えるネットワーク構造が異なる。この点に注目した研究も、近年機械学習分野を中心に盛んに行われており、一般にテンソル分解問題と言われている。

他方、量子コンピューティングでは、全てのユニタリ演算子を表すのに必要な、最低限の量子ゲートのセットを考える。この最低限の量子ゲートのセットは、量子デバイス毎に用意されているが、必要十分な条件は、いかなる2量子ビットユニタリ演算子も表すことができることとなる。また、2量子ビットユニタリ演算子は、典型的な量子ゲートセットに分解するための解析的な方法が確立している。そこで、2量子ビットゲートを基本要素と考えると、一般のユニタリ演算子を量子コンピュータで表現するには、2量子ビット演算子というテンソル分解と見なすことができる。

上記を背景に、我々は一般のユニタリ演算子を2量子ビットユニタリ演算子へと分解するための手法について検討した。また、現状の量子コンピュータの実機は、ノイズが大きいことから、近似の範囲でより回路長が短くなるようなものが望ましい。そこで、これを量子回路の構造最適化問題と見做し、テンソル分解問題で用いられている方法論を採用し、その最適化を試みた。

3. 結果

テンソル分解法をベースとした量子回路の構造最適化のベンチマークを撮るため、我々は二つの場合について、その性能を評価した。

ベンチマークの一つ目としては、Haar ランダムなユニタリ演算子の分解する問題とし、これに我々の方法を適用した。その結果、5量子ビットの Haar ランダムなユニタリ演算子であれば、精度に応じて無理なく2量子ビット演算子で効率的に分解できることがわかった。特に、フィデリティが 10^{-3} 程

度とした場合は、厳密な解が得られるための理論最低値よりも、少ない制御ゲート数の量子回路を安定的に見つけることができた。ただし、5量子ビットより大きな Haar ランダムなユニタリ演算子を分解するためには、さらに多くの計算コストが必要となることから、別の方法と組み合わせる必要があることがわかった。

ベンチマークの二つ目としては、2量子ビットユニタリ演算子を階段状に並べたものから一つの大きなユニタリ演算子を構成し、この大きなユニタリ演算子に我々のテンソル分解法を用いた最適化を適用し、元の階段状のユニタリ演算子の積に分解できるかを調べた。その結果、5量子ビット演算子よりも大きな場合でも、安定的に元の回路構造を見つけることができた。すなわち、我々の方法は、こうした量子回路に構造的情報がある場合に、解析的なユニタリ分解の方法と比べて極めてよい性能を示すことがわかった。

4. まとめ

我々は、テンソル分解の方法論を用いた量子回路の最適化法について議論した。その結果、精度の範囲によっては、理論最低値よりも少ない制御ゲート数の量子回路を見つけることができること、さらに、量子回路に何かしらの構造がある場合に、解析的な方法に比べてより良い性能を示すことを実証した。ただし、ユニタリ演算子の量子ビット数が増えるに従って、我々の方法では最適化が難しくなるため、よりスケーラブルな方法論の開発が必要となることがわかった。

5. 今後の計画・展望

本年度の計算を通して、量子回路最適化法に関する確かな進展と、新しい課題が見えてきた。特に、任意の量子回路を分解することは難しいが、量子情報に特徴的な構造などがあれば、効率的な圧縮が行えることを示した。したがって、量子多体状態や一般の画像情報など、さまざまなデータについて、それにテンソルネットワークの構造を見つけ、そのネットワークに特化した方法論の開発が有効であると考えている。

2023 年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

[1] R.-Y. Sun, T. Shirakawa, S. Yunoki, “Efficient variational quantum circuit structure for correlated topological phases”, Phys. Rev. B 108, 075127 (2023).

【会議の予稿集】

[2] R.-Y. Sun, T. Shirakawa, S. Yunoki, “Scalable Quantum Simulation for Topological Phases on NISQ Devices”, IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering (QCE) 2023, Bellevue, Washington, USA (Sep. 17-22, 2023).

[3] Tomonori Shirakawa, Seiji Yunoki, “Approximate State Preparation using Tensor Network Optimization Techniques”IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering (QCE) 2023, Bellevue, Washington, USA (Sep. 17-22, 2023).

【口頭発表】

[4] 白川知功、“テンソルネットワーク法を基にした量子計算シミュレーション”、第19回 HPC-Phys 勉強会、和光、埼玉 (2023年8月31日).