

課題名(タイトル):

Tensor network simulation for quantum many-body problems

利用者氏名:

○白川 知功

理研における所属研究室名:

計算科学研究センター 量子系物質科学研究チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係する課題との関係
量子多体問題を解くためには、指数関数的に大きな量子情報を扱う必要があるため、そのまま計算することは難しい。そこで、この指数関数的に大きな情報量を古典計算機で扱うために、量子情報を圧縮して表現する方法として、テンソルネットワーク法は発展してきた。また、近年では、量子多体問題を解くために量子計算機を利用することが検討され始めているが、ノイズが大きな現在の量子計算機の適用範囲は限定的である。そこで、これらの適用範囲を広げるために、テンソルネットワーク法のアイデアを用いることにも注目が集まっている。

そこで、本研究では、量子計算機とテンソルネットワーク法を組み合わせた研究手法を用いて、量子多体問題の課題に取り組んだ。

2. 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法の性能向上する方法として、大規模並列計算機のためのテンソルネットワーク法: Improved parallel time-evolving block decimation (Improved pTEBD)を開発した。この方法では、テンソルネットワークを構成するテンソルをブロックに分け、各ブロックを各計算ノードが担当する。ただし、このブロック毎にTEBD法を行うと、全体のカノニカルゲージが壊れてしまうという問題点がある。そこで、我々はこれを解決する方法として、parallel norm stabilization と trivial simple update を利用した parallel regauging を導入した。これらの計算工程は、すべて隣接するノード間通信のみを必要とするため、通信が局所的になり、より良い並列化性能が期待できる。

他方、任意の量子状態に対応する量子回路を作るには、指数関数的な計算時間が必要となる。そこで、我々は任意の量子状態に対して、自動で量子回路を生成するアルゴリズム: Automatic Quantum Circuit Encoding (AQCE) 法を開発した[1]。この方法では、テンソルネットワーク法で用いられている最適化法を導入することで、より良い回路を

自動で探索する方法であるが、より量子ビット数が多い場合には、精度があまり出ないことがわかった。そこで、今年度は、これを改善するための方法として、テンソルネットワークから量子回路を生成するための方法論に関する数値実験を行った。

3. 結果

Improved pTEBD 法を用いた並列計算を行った結果、我々は量子ビット数に対して完全な weak scaling を示すことがわかった[2]。なお、このベンチマーク計算としては、ランダムな量子回路に対する数値実験を行った。

また、回路生成の問題では、テンソルネットワークから各々の多量子ビットユニタリ演算子に AQCE を用いることで、スケーラブルな量子回路生成が行える場合があることを示した。なお、得られた量子回路は量子コンピュータ実機上で実際に走らせた。その結果、ノイズによるエラーよりも精度の良い量子回路が、極めて低コストで構築できることがわかった。

4. まとめ

現状の量子計算機は、ノイズの影響が大きいいため、古典計算機による研究のサポートが必要不可欠である。今回開発した Improved pTEBD 法は、量子計算機の結果を検証する上で、重要な役割を果たすことができる。

また、基底状態に対する量子回路の生成は、量子計算機を量子多体問題に応用する上で、必要不可欠な技術要素である。今回の数値実験では、100量子ビットクラスの基底状態に対応する回路の生成に成功しており、これを用いた量子多体問題への応用が期待できる。

5. 今後の計画・展望

現状の量子計算機は、ノイズの影響は大きいものの、数100量子ビットの規模の量子コンピューティングが可能なデバイスとなっている。したがって、古典計算機を用いて、このノイズの影響を低減できるアルゴリズムやシミュレーション方法の発展が必要である。

2024 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, “Improved real-space parallelizable matrix-product state compression and its application to unitary quantum dynamics simulation”, *Phys. Rev. B* **110**, 08514 (2024).
- [2] T. Shirakawa, H. Ueda, S. Yunoki, “Automatic quantum circuit encoding of a given quantum state”, *Phys. Rev. Research* **6**, 043008 (2024).

【口頭発表】

- [3] 白川知功、“ノイズの大きな量子コンピュータを用いた量子多体系のシミュレーション”、第13回 兵庫県マテリアルズ・インフォマティクス講演会、2025年1月29日、オンライン
- [4] T. Shirakawa, “High-Performance Computing to Support the Application of Quantum Computers for Quantum Many-Body Problems, International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics (MPQCP 2025), Kobe, Japan (Jan. 21-22, 2025).