

課題名(タイトル):

Simulation of quantum many-body systems by tensor network method

利用者氏名:

○幸城 秀彦(1,2)

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

1. 本課題の研究の背景、目的、関係する課題との関係
量子多体系シミュレーションは電子などの微視的粒子が多数集まった場合の振る舞いに関するシミュレーションである。従来は物質中の電子状態のシミュレーションが主たる対象であったが、近年量子計算機が実用化に向けた開発が活発となっており、量子計算機の活用方法を模索する量子回路シミュレーションも量子計算機開発に呼応して活発になっている。量子計算機上で実行されるアルゴリズムは、量子的な情報素子である量子ビットと、量子ビットに対する状態操作である量子ゲートの組み合わせで表現され、その具体的な実装が量子回路と呼ばれる。その量子回路をスパコンなどの従来の計算機で行い、量子計算機の実行結果の予測を行うのが量子回路シミュレーションである。量子回路シミュレーションは量子計算機の動作確認に用いられる他、量子計算機が従来の計算機では計算不可能な問題を解くことができるのか検証するための比較対象としての役割がある。量子アニーリング法は量子計算機を利用した解法の一つであり、容易に実現可能な初期状態から最低エネルギー状態を保ちながら変化させることで所望の状態を実現する方法である。状態を変化させる際に、相転移を跨ぐ場合に高精度の結果を得るには長時間必要であることが知られており、どの程度時間が必要なのか興味が持たれている。本研究では実際に数値シミュレーションを実施し、必要な時間を定量的に調べることを目的としている。

2. 具体的な利用内容、計算方法

1 次元的な量子スピン系に対して、行列積状態を用いたTEBD 法による量子アニーリング法に対応する実時間発展シミュレーションを行なっている。量子アニーリング法では、ハミルトニアンシミュレーションと呼ばれる型の量子回路を実行しており、考慮する全ての量子ビットに作用する巨大な指数関数行列型のゲートを実装する。TEBD 法では巨大な指数関数行列を取り扱いが容易な小さな指数関数行列に近似的に分解して計算を行っている。状態変化にかける

時間の長さや時間刻み幅をパラメーターとして変化させ、得られるエネルギーの精度を調べている。

3. 結果

現在シミュレーションを実行中である。

4. 今後の計画・展望

現在進行中のシミュレーションが終了し、結果がまとまり次第学会発表や論文投稿を行なう予定である。