2025年度　利用報告書

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

(3) 計算科学研究センター　次世代計算基盤アプリケーション開発ユニット

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種であり、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。

昨年度は主に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 法を用いてシミュレーションを行なっていた。TEBD 法では、通常の量子系における指数関数的自由度の困難を克服するために重要な自由度のみを取り出す、ボンド次元ベースの近似処理を行っている。効率的に状態が圧縮できる場合はこれにより多項式時間での高精度計算が可能になる一方で、効率的な圧縮ができない場合が知られている。そのため、信頼性が不明な結果が得られた場合、この近似によって発生したアーティファクトなのか、実際の物理系の問題なのかの判断が難しい場合がある。そこで、そのようなアーティファクトの発生しない厳密な 2 次形式表現を利用した微分方程式ソルバーベースの数値シミュレーションを実施した。これは XX 模型という厳密に模型にのみ適用可能なため汎用ソルバーではないが、TEBD 法の信頼性を確立するために相補的に用いるものである。

2.　具体的な利用内容、計算方法

1 次元交代鎖 XX 模型を Jordan-Wigner 変換を用いて fermion 二次形式にする。その行列表現が非自励な Lie 群型微分方程式として定式化できるため、DifferentialEquations.jl という汎用微分方程式ソルバーパッケージで求解した。シミュレーション時間の長さ T、相転移点を経由するか否かを変化させて基準とする基底状態とのエネルギーのずれを計算した。

3.　結果

結果として、相転移点を跨がない簡単なケースでは T に比例してエネルギー差が減少する振る舞いが見えた一方で、相転移を跨ぐ難しいケースでは、T に対してべき的な振る舞いを見せることが確認できた。

2025 年度 利用研究成果リスト

【口頭発表】

幸城秀彦,「ボンド交代スピン鎖の実時間ダイナミクスの解析」, 計算科学の新展開:TN スキームと量子・古典融合ワークショップ, 2025 年 3 月, AP イノゲート大阪.