

研究終了報告書

「量子計算機による量子ダイナミクス研究に向けた技術基盤の創出」

研究期間:2020年11月～2024年3月

研究者: 曾田 繁利

1. 研究のねらい

本研究では NISQ デバイス上での量子多体系のダイナミクスの研究に対して必要な技術基盤の構築を目的とする。量子多体系の示す集団的量子効果は、高温超伝導体や次世代エネルギー変換材料、マルチフェロイック材料等の次世代高機能・高性能材料をはじめとした魅力的な性質と応用が多数示されており、次世代科学の基盤技術として大いに期待されている。このような量子多体系を明らかにするための理論的研究手法として、平均場近似に基づく解析的手法は、系の自由度を精密に表現することが困難であるため適用は難しい。そのため、量子多体系の理論的研究においては数値的手法による取り扱いが重要であると考えられている。しかしながら、量子多体系の自由度は系のサイズに対して指数関数的に増大する一方、量子多体系の統一的な物理現象を明らかにするためには系のサイズによる効果を含まない物理量の計算が必要とされるため、より大きな系での計算が求められる。また、より複雑な系、例えば電子-フォノン相互作用について考えた場合、系の自由度にフォノンの自由度が加わるため計算は一層困難となる。そこで、本研究では量子多体系に対する新たな研究手法として量子計算機を用いた研究手法の開発を主要な目的とする。すでに、量子多体系の研究に利用可能な量子フーリエ変換を応用した量子位相推定や変分法による状態計算の量子アルゴリズムである量子固有値ソルバーなど量子多体系に適用可能な手法の開発も進んでいる。また、NISQ デバイスの有望な応用先のひとつとして量子多体系のダイナミクスへの応用が考えられている。特に、量子多体系のダイナミクスは既存の古典計算機による手法では困難の多い問題であり、基底状態と比較してその理解は進んでいない。また、現在報告されている量子計算機を用いた量子ダイナミクスの計算は、実質的に有効な時間が非常に限定されており、その実応用の範囲は限定されと考えられる。そこで、本研究では NISQ デバイスの量子多体系のダイナミクス研究の立場から、より長時間への適用が可能な量子計算機による手法を開発し、実際に開発した手法を量子多体系のダイナミクス研究に応用した研究を実施することで本分野のブレークスルーを目指す。

2. 研究成果

(1) 概要

本研究では、NISQ での量子多体系のダイナミクスシミュレーションを実際の理論的・数値的研究において、これまでの古典計算機での限界を超えて適用可能な手法とすることを目的として、その研究開発を行った。特に、これまでの NISQ における量子多体系の実時間ダイナミクスシミュレーションで問題点として指摘されていた、(1)ノイズにより短時間の実時間シミュレーションに限定される、また(2)鈴木-トロッター分解による誤差に対し、これらの問題点を解決するための手法の研究開発を行った。そのために、まず開発する手法の有効性の評価と応用研究に向け参照となる研究データの蓄積を目的に研究テーマ A として「密度行列繰り込み群法による

量子ダイナミクスシミュレータの研究開発」を行った。その上で、(1)ノイズにより短時間の実時間シミュレーションに限定される点に対し、研究テーマ B として「長時間の量子ダイナミクスシミュレーション実行のための量子-古典ハイブリッドアルゴリズムの研究開発」を行い、時間に対する分割とその繰り返し計算により目的とする物理現象を明らかにする時間範囲の実時間シミュレーションを可能にした。また、(2)鈴木-トロッター分解による誤差に対し、研究テーマ C として「NISQ による直交多項式展開法アルゴリズムの研究開発」を行い、鈴木-トロッター分解によらない実時間シミュレーション手法を開発した。さらに、研究テーマ D として「量子ダイナミクス研究のために開発した手法の改良」を行い、より効率的な手法への改良と、様々な量子格子模型への対応に向けた拡張を行なった。

(2) 詳細

研究テーマ A「密度行列繰り込み群法による量子ダイナミクスシミュレータの研究開発」

本研究課題で実施する NISQ デバイスによる量子ダイナミクス研究手法開発に向け、その研究実施に必要な量子シミュレータの開発を行った。量子計算のシミュレータとしては、数値的厳密な取り扱いによるものを中心に多数存在しており、本研究課題の実施においてもこれらのシミュレータを活用する予定である。それに対し、本研究で開発するシミュレータは密度行列繰り込み群(DMRG)法によるものである。DMRG 法は、その数値的手法において系の内部自由度を任意の数で打ち切ることから、精度よく表現可能な量子状態には制限がある一方、数値的厳密な取り扱いの限界を超えた量子ビット数を取り扱うことができる。特に、量子多体系のダイナミクス研究における量子計算機の古典計算機に対する超越性を明らかにするため、スーパーコンピュータ「富岳」をはじめとした最新の大規模計算機での実行を念頭にその開発を進めた。開発した大規模並列化された DMRG 法プログラムについては、「富岳」を中核とする一般利用課題に 2021 年度から 2023 年度の期間に6件採択されており、今後もその利用が期待される。

研究テーマ B「長時間の量子ダイナミクスシミュレーション実行のための量子-古典ハイブリッドアルゴリズムの研究開発」

本研究では、古典の大規模計算機による既存の手法では難しい量子多体系のダイナミクスを明らかにするための NISQ での実行を念頭においた手法の開発を目的としている。そこで、本研究テーマでは NISQ 上で直接実行することが難しい長時間の量子多体系の実時間シミュレーションを実現するための手法の研究開発を行った。また、本研究テーマは、後に開発する量子計算機による直交多項式展開法の実現(研究テーマ C)に向け、その実現のために必要な量子-古典アルゴリズム開発の側面も持っている。

本手法では、NISQ デバイスである程度精度良く量子多体系の実時間発展のシミュレーションを実行できると考えられる時間を設定し、その時間の範囲内でのシミュレーション結果をつなぎ合わせることでより長時間のシミュレーションを実行することを考えた。そのための方法として、完全系による展開を念頭に置いた量子回路を導入することで、本研究テーマの目的を実現することを試みた。ただし、取り扱う量子状態の係数の情報量は N に対して指数関数的に増大するため、この方法の適用は N に対して強い制限が存在する。

そこで、 N に対して指数関数的に増大する量子状態の係数の情報量を圧縮することを目的に、最適化パラメータを含む適当な量子回路を導入した手法の開発を試みた。ここで導入した量子回路の最適化パラメータは、全ての量子ビットが 0 の状態となる $|00\cdots 0\rangle$ 状態を原点として、量子ビットが 1 の状態となる量子ビットの数、つまり $00\cdots 0$ の文字列からの Hamming 距離を最小とするようコスト関数を最小化するように決定する。ここで決定した量子回路とその逆変換に対応する量子回路を時間分割の

前後に挟むことで、より長時間の連続した時間領域のシミュレーションを実現した。図 1 に本手法による2つの時間領域に分割した場合の横磁場 Ising 模型の全磁化の時間発展の結果を示す。ここでは、 $|000\rangle$ 状態からの Hamming 距離が 1 以下となる状態のみを採用した初期状態を用いて2番目の時間領域の実時間発展を行なっている。図 1 では時間に対する分割を行っていない結果も同時に示しており、本手法の結果とよく一致していることが確認される。

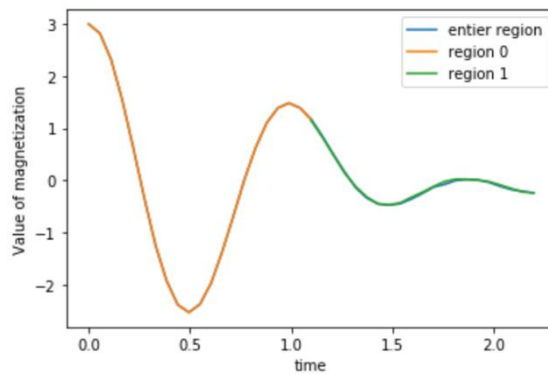


図 1 最適化パラメータを含む量子回路を用いた横磁場 Ising 模型の全磁化の時間発展。橙線と緑線は二つに分割された時間領域でのそれぞれの結果を示す。青線は分割を行わずに計算された結果であり、分割した結果と良く一致している。

研究テーマ C「NISQ による直交多項式展開法アルゴリズムの研究開発」

これまでのゲート式量子コンピュータによる量子多体系のダイナミクスシミュレーションでは、鈴木-トロッター分解による誤差が指摘されていた。そこで、本研究では鈴木-トロッター分解によらない量子多体系の実時間シミュレーションを量子コンピュータにより多項式時間で実現することを目的に、直交多項式展開法の量子-古典ハイブリッドアルゴリズムの開発を行なった。

ゲート型量子計算機では、時間発展演算子に対し鈴木-トロッター分解を用いることにより量子多体系の実時間シミュレーションを実行することが可能である。その際、鈴木-トロッター分解による誤差は、特に NISQ で長時間シミュレーションを実行する際に分割数に対応して量子回路が「深く」なることから困難が生じると考えられる。そこで、本研究課題では鈴木-トロッター分解に依らない量子多体系の実時間シミュレーションの手法として直交多項式展開法による手法の開発に取り組んだ。直交多項式展開法では、特殊関数としてルジャンドル多項式を採用した場合、時間発展演算子は球ベッセル関数を係数として展開される。本研究での開発として、まず、古典計算機での計算と同様に特殊関数の満たす三項漸化式を用いた手法の開発に取り組んだ。この三項漸化式では、ハミルトニアンとルジャンドル多項式の次数に対応したベクトルの積が現れ、古典計算機による計算においても最も計算コストを要する部分である。この行列・ベクトル積について、符号に対応する大域的位相を得る補助量子ビットを導入することで、量子回路により結果を得ることを可能にした。本手法による結果は、古典計算機による精密計算と良い一致が得られた。

研究テーマ D「量子ダイナミクス研究のために開発した手法の改良」

本研究テーマでは、ここまで開発した量子計算機による量子ダイナミクス研究手法の改良を行い、より高効率かつ高精度な手法、また電子系をはじめとした各種量子格子模型への対応を目指した研究開発を目的とする。

まず、量子計算機による量子ダイナミクスの理論的・数値的研究を行うために開発した直交多項式展開法の問題点として、これまで開発した手法では、量子状態のベクトル要素を一度古典計算機に転送するため、系のサイズに対して情報量が指数関数的に増大する。そこで、本研究では直交多項式展開法における各次数に対する計算を量子計算機で行い、その状態ベクトルにより求める物理量の演算子の期待値を計算し、これを古典計算機上で直交多項式展開法の係数とともに足し上げることで、求める物理量を計算する。量子計算機における上述の取り扱い、スワップテストを応用することで可能となる。また、古典計算機場で扱う情報はすべてスカラー量となるため、系のサイズに対して扱う情報量が指数関数的に増大することなく取り扱うことが可能となった。

また、直交多項式展開法におけるハミルトニアン¹⁾の冪を計算する手法として、時間発展演算子の差分を用いた計算手法による改良を試みた。この手法を用いる利点は、ハミルトニアン¹⁾の各項を一度に取り扱うことができる点にある。そのため、本研究における量子計算機による直交多項式展開法の実行の効率化の観点から有用であると考えられる。そこで、本研究による開発した量子計算機による直交多項式展開法のハミルトニアン¹⁾の冪を計算する部分に対してこの差分による手法を実装し、これまでの手法との比較・検証を行った。短時間の時間発展、つまり直交多項式展開法で低次の展開で十分な計算精度が得られる時間領域に対しては十分有効であることが確認された一方、高次の展開が必要なより長時間の時間領域の計算のためには、この差分による手法では非常に高精度な計算が要求されることが確認された。

さらに、開発した量子多体系のダイナミクスシミュレーションのための量子-古典ハイブリッドアルゴリズムの電子系をはじめとした他の量子格子模型への拡張を行なった。これまでの研究開発では、その手法の開発が目的であるため、量子計算機において直接適用可能な量子スピン系に対し、その研究開発を行ってきた。さらに、本研究課題で取り扱う手法は特に量子スピン模型に限定された手法ではなく、電子系をはじめとした他の量子格子模型に対しても適用可能である。このような拡張は、実際の応用研究においても重要であるため、ここでその拡張を行なった。電子系の代表的な量子格子模型である Hubbard 模型を出発点に、Bravyi-Kitaev 変換によりその実装を可能にした。実際に拡張された本研究課題の量子-古典ハイブリッドアルゴリズムによる結果は、数値的厳密な手法、および研究テーマ A で開発した量子ダイナミクスシミュレータによる時間依存 DMRG 計算の結果と良い一致が得られることが確認された。

3. 今後の展開

本研究で行なった量子多体系の実時間ダイナミクスを取り扱う量子-古典ハイブリッドアルゴリズムによる手法は、NISQ での実行を目指し開発された。特に、これまで NISQ における量子多体系の実時間ダイナミクスシミュレーションにおける問題として認識されていたノイズにより短時間の実時間シミュレーションに限られる点、および鈴木-トロッター分解による誤差に対し、研究テーマ B で取り上げた測定と情報圧縮による量子-古典ハイブリッドアルゴリズム、また鈴木-トロッター分解

による誤差を含まない直交多項式展開法による量子-古典ハイブリッドアルゴリズムを開発し、これらを組み合わせて実行することで現在の NISQ においても有効な量子ダイナミクス研究のための手法を実現した。本研究で開発した手法は、すでに 1000 量子ビットを超える実機が実現していることから、古典計算機上で厳密に取り扱い可能な系のサイズを大きく超える計算が可能である。また、系の次元性や幾何学的なフラストレーションによらない手法であることから、密度行列繰り込み群法や量子モンテカルロ法など、量子多体系を取り扱う手法として発展したこれらの手法による取り扱いを超えた手法であると考えられる。その一方、計算精度の点からは、NISQ におけるノイズによる誤差や観測のショット数に依存する統計誤差を含むことから、古典計算機における精密計算の実現には困難が生じる。そのため、本研究で開発した手法の高精度化には今後の量子計算機実機の発展が待たれるところである。特に、耐障害性量子コンピュータが実現した場合、本研究で開発した量子計算に対応した直交多項式展開法は、量子位相推定法を用いることにより精密に実行することが可能となる。諸説あるが 2040 年頃実現すると考えられている耐障害性量子コンピュータを用いることにより、本手法はさらなる発展を遂げることが期待される。特に、本研究で取り上げた直交多項式展開法による実時間ダイナミクスでは、その展開が比較的低次で可能であることから NISQ での実行も十分可能であると考えられたが、耐障害性量子コンピュータを用いた場合ではより高次の展開が可能となることから、量子多体系の励起ダイナミクスや有限温度の計算を含め、様々な応用が可能となると考えられる。

4. 自己評価

当初開発を予定していた手法からいくつかの変更点があったが、目的は概ね達成できたと考える。研究テーマ A で取り扱った密度行列繰り込み群法による量子ダイナミクスシミュレータは、スーパーコンピュータ「富岳」をはじめとした大規模計算機での効率的な実行を目指し開発された。開発された量子ダイナミクスシミュレータは「qNET」として公開されており、実際に「富岳」をはじめとした大規模計算機を用いた量子多体系研究にも用いられており、その研究成果を報告している。研究テーマ B で取り扱った長時間の量子ダイナミクスシミュレーション実行のための量子-古典ハイブリッドアルゴリズムの研究開発では、時間方向に対して計算を分割することで、NISQ において十分な精度で計算可能な時間内での計算を繰り返すことで、目的の時間までのシミュレーションを実行することを目的とした。当初、ランダムな量子回路を導入しそのサンプル平均をとることにより、この様な計算を実現することを考えた。しかしながら、この方法では現実的なサンプル数における統計誤差から、目的とする長時間ダイナミクスの実現に困難が生じることが分かった。そのため、時間に依存する状態の精密な測定と、機械学習分野で用いられるパラメータ最適化手法による量子状態の情報圧縮と復元により、目的とする長時間ダイナミクスを実現した。研究テーマ C では、鈴木-トロッター分解によらない量子状態の時間発展手法として、量子計算機を用いた直交多項式展開法の量子-古典ハイブリッドアルゴリズムの開発を行った。古典計算機における符号ビットに対応する大域位相を計算するための補助ビットを加えた特殊関数の三項漸化式を計算するための量子回路を開発することで、量子計算機を用いた直交多項式展開法を実現した。研究テーマ D では、これまでに開発した手法の改良と拡張に取り組んだ。研究テーマ B の長時間ダイナミクスを実現するための手法と研究テーマ C の量子計算機による直交多項式展開法を組み合わせることにより、直交多項式展開法におけるより高次の展開を実現することで、長時間の

量子ダイナミクスシミュレーションに耐えうる手法へと改良された。さらに、直交多項式展開法の各次数に対応するベクトルにより求める物理量の期待値をスワップテストをベースとした手法により計算し、その期待値のみを古典計算機により取り扱うことで、より効率的な手法を実現した。また、開発した量子多体系のダイナミクスに対する量子-古典アルゴリズムのより幅広い応用研究を目指し、電子系をはじめとした系へ拡張するためのプログラム開発を行っている。また、本研究で開発した手法から派生した研究開発として、より大規模な並列計算機となることが考えられる古典の大規模計算機に対する並列化手法として、本研究の研究テーマBから発想を得た量子多体系系計算のための大規模並列アルゴリズムの開発など、将来の量子計算機も含めた計算機環境における手法の開発へ向けて、本研究の成果を元に今後も継続して研究を進めたい。

5. 主な研究成果リスト

(1) 代表的な論文(原著論文)発表

研究期間累積件数: 7件

1. “Density-matrix renormalization group study of optical conductivity of the Mott insulator for two-dimensional clusters”, Physical Review B, 2021, Vol. 104, 205123, pp.1-9
モット絶縁体の光伝導度の実数部は、スピンや電荷の自由度が互いにどのように相互作用するかに関する多くの情報を持っている。そこで、本研究で開発した密度行列繰り込み群法による量子多体系の実時間シミュレーションを行い、正方格子上的 Hubbard 模型の光伝導度を調べた。その結果、モットギャップエッジに励起子のピークを見いだし、励起子ピークが磁気効果から生成されることを確認した。
2. “Magnetic phase diagrams of the spin-1/2 Heisenberg model on a kagome-strip chain: Emergence of a Haldane phase”, Physical Review B, 2021, Vol. 104, 224417, pp.1-8
幾何学的なフラストレーションを持つスピン $S=1/2$ カゴメ鎖の磁場化での磁気相図の理解はこれまであまり進んでいなかった。そこで、本研究で開発した密度行列繰り込み群法による量子多体シミュレータを利用してカゴメ鎖の磁化比 $0, 1/5, 3/10, 1/3, 2/5, 7/15, 3/5, 4/5$ における磁気相図を構築し、それぞれの磁氣的性質を調べた。その結果 15 個の磁化プラトー相を発見し、そのうちの 1 つはスピン-1 ハルデン相と等価であることを明らかにした。
3. Glassy dynamics of the one-dimensional Mott insulator excited by a strong terahertz pulse, Physical Review Research, 2022, Vol. 4, L032019, pp.1-8
強相関係における非平衡状態の解明は、新しい量子相の出現の鍵を握っている。そこで、本研究で開発した密度行列繰り込み群法による実時間シミュレータにより拡張 Hubbard 鎖を対象に、パルス励起による絶縁体-金属転移を調べた。その結果、量子トンネル効果を誘起する強い単周期パルスと半周期パルスが多数のキャリアを導入しても、Drude の重みに寄与するスペクトル重みが抑制されることが確認された。

(2) 特許出願

研究期間全出願件数: 0 件(特許公開前のものは件数にのみ含む)

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

- S. Sota, “Development of Massively Parallel DMRG for Fugaku”, The 3rd meeting for application code tuning on A64FX computer systems, 2021/02/03, オンライン.
- T. Tohyama, K. Tsutsui, K. Shinjo, S. Sota, “Exciton-assisted low-energy magnetic excitations in a photoexcited Mott insulator on a square lattice”, APS March Meeting 2023, 2023/03/07, Las Vegas (USA).
- K. Tsutsui, K. Shinjo, S. Sota, T Tohyama , “Theoretical Study of Magnetic Excitations in a Photoexcited Two-dimensional Mott Insulator”, SCES 2023, 2023/07/05, Korea.
- T. Tohyama, K. Shinjo, S. Sota, S. Yunoki , “In-Gap Spectral Weight of the Optical Conductivity Induced by a Strong Subcycle Pulse in Low-Dimensional Mott Insulators”, CCP2023, 2023/08/06, Kobe.
- 曾田繁利, “量子多体系研究を取り巻く最近の計算環境と量子計算”, 凝縮系物理のフロンティアー強相関電子系と量子計算ー, 2023/12/26, 静岡.