

革新的な量子情報処理技術基盤の創出
2020 年度採択研究者

2020 年度 年次報告書

品岡 寛

埼玉大学 大学院理工学研究科
助教

スパースモデリングを用いた固体の革新的量子計算技術の開発

§ 1. 研究成果の概要

2020年度は、スパースモデリングに基づく電子浴のコンパクトな離散化法を開発し、現実物質における必要バスサイト数の見積もりを行った。動的平均場理論 (DMFT)による固体の計算において、注目する活性空間の外の情報は、電子浴として取り込まれる。量子計算を用いて量子不純物問題を解くには、アクション形式で書かれる電子浴を一旦、有限個のバスサイトを用いて離散化する必要がある。これは電子浴を記述する混成関数をフィッティングすることで通常行われるが、そのフィッティングは非凸かつ悪条件であり、多くの縮退した解が存在する。我々は、グループ LASSO と呼ばれるスパースモデリング技術を使うことで、縮退した解の中から、バスサイト数が少ない解を自動的に選び出す技術を開発した。この手法を 1. 乱数で生成した人工的な混成関数、2. 典型的な鉄系高温超伝導体 LaAsFeO の20軌道不純物問題、の2つに適用し、フィッティング精度と必要なバスサイトの数の関係を調べた。結果として、必要なバスサイト数は不純物内の自由度に比例する一方、逆温度およびフィッティング精度には対数的にしか依存しないことが明らかになった。典型的な鉄系高温超伝導体の母物質 LaAsFeO (結晶構造は図2)の解析からは、適当な精度でのフィッティングには、100 から数百程度のバスサイトが必要であることが分かった。100 バスサイト系の計算は現在の古典アルゴリズムでは極めて困難であり、また量子計算においても Variational Quantum Eigensolver (VQE)のパラメータ削減が必須である。一方、VQE に基づく量子不純物ソルバーに関しては、Julia 言語を用いて実装中である。バックエンドとして、OpenFermion と Qulacs を利用する。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Sparse modeling of large-scale quantum impurity models with low symmetries”, Hiroshi Shinaoka and Yuki Nagai, Physical Review B **103**, 045120 (2021)