

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

曾田 繁利

理化学研究所 計算科学研究センター
技師

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

§ 1. 研究成果の概要

2020年度は、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の研究手法開発のために必要な量子シミュレータの開発を行った。量子計算を対象にする量子シミュレータ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、本研究課題でも利用する予定である。一方、2020年度に開発した量子シミュレータは密度行列繰り込み群(DMRG)法、およびDMRG法を一般化したものに対応する行列積状態(MPS)を基本とした数値繰り込みによるものである。このようなDMRG法、およびMPSによる手法は、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ため、実用上有効な精度で表現可能な量子状態には一定の制限がある。しかしながら、DMRG、またはMPSによる取り扱いでは、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徴がある。このような量子シミュレータを開発する目的には、量子計算、および量子ダイナミクスのシミュレーションを行うことに留まらず、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ことも含まれる。DMRG法による量子シミュレータについては、これまで課題実施者が開発してきた大規模並列DMRG法プログラムを基本に、これを量子計算シミュレーション実施のために拡張することで、その開発を行った。さらに、本研究におけるNISQデバイスによる量子多体系のダイナミクス手法の開発における参照データ作成に用いるために必要な開発を行った。また、MPSによる量子シミュレータについては最新の古典の大規模計算機の限界に挑むことを目標に1から開発を行った。スーパーコンピュータ「富岳」での実行を念頭に開発を行い、実際に「富岳」上での実行で非常に高い実行性能が実現していることが確認された。