

革新的な量子情報処理技術基盤の創出
2019 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書

大久保 毅

東京大学 大学院理学系研究科
特任准教授

テンソルネットワーク状態を活用した量子多体系基底状態計算手法の開発

§ 1. 研究成果の概要

本研究では、量子多体系の基底状態計算に、近未来に実用化される NISQ 量子コンピュータを効率的に用いるための手法開発を目指している。2021 年度は、前年度に考案した、テンソルネットワーク状態と NISQ を高度に融合した新しい基底状態計算方法の枠組みについて、要素技術の確立、検証、高精度化を行った。

第一に、古典コンピュータでの計算が難しい量子多体系の代表例としてスピン液体状態に注目し、提案手法の具体的な検証を行った。まず、スピン液体の量子的な長距離相関を適切に表現可能なテンソルネットワーク状態を量子コンピュータ上で再現することを検討し、2 つの量子ビットに跨るユニタリ演算子 (2 量子ビットゲート) を組み合わせることで、このテンソルネットワーク状態を厳密に表現できることを明らかにした。次に、この長距離相関を表現するテンソルネットワーク状態に短距離相関を表現すると期待される別の 2 量子ビットゲートを付加し、そのゲートのパラメータを変えることで、量子状態のエネルギー期待値が改善する可能性を検討した。その結果、付加するゲートが少ない場合には、エネルギーの改善はほぼ見られないことが明らかとなったが、一方で、2量子ビットゲートからユニタリ性の制限を外すことで、大幅にエネルギーが改善することも確認された。

第二に、古典コンピュータと NISQ を組み合わせることで得られた高精度な量子多体状態の物性を古典コンピュータで解析する手法として、テンソルネットワークの縮約に関するアルゴリズムの検討を行なった。平均場近似に基づく、「平均場環境」による期待値計算、モンテカルロサンプリングによる統計誤差付きのテンソルネットワーク縮約、および、テンソルネットワークの実空間くりこみに基づく縮約の三種類について、比較・検討し、大規模なテンソルネットワーク状態の期待値を古典コンピュータで計算可能とする手法開発を行なった。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “TeNeS: Tensor Network Solver for Quantum Lattice Systems” Y. Motoyama, T. Okubo, K. Yoshimi, S. Morita, T. Kato, N. Kawashima, arXiv:2112.13184, accepted for publication in Computational Physics Communications.
- 2) “Bond-weighted Tensor Renormalization Group” D. Adachi, T. Okubo and S. Todo, Physical Review B **105**, L060402-1-6 (2022).