

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

2021 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

2021年度は、本領域内のさきがけ研究者である水上渉氏および研究補助者（D1 櫻井理人）と共同で、量子不純物問題に対する量子古典ハイブリッドアルゴリズムを提案した。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。離散化して得られる有効模型は、電子相互作用を持つ軌道がバスサイトと混成した構造を持つ。DMFTによる自己無撞着計算を行うには、基底状態のエネルギーに加え、1粒子応答関数（グリーン関数）を計算する必要がある。DMFTの定式化は、実時間もしくは虚時間で行われるが、後者は少ないバスサイト数で自己無撞着計算を実行できるメリットがある。しかし、ユニタリゲートからなる量子回路を用いて、虚時間グリーン関数を効率よく計算することは非自明な課題であった。

本研究では、時間発展のための量子古典ハイブリッドアルゴリズム Variational Quantum Simulation (VQS)を応用することで、虚時間グリーン関数を計算する計算手法を提案した[1]。従来のVQSでは、規格化された波動関数の虚時間発展を計算することが可能であった。新規手法では、1. 波動関数のノルムの虚時間依存性を簡便に計算し、2. グリーン関数の計算に必要な1粒子励起状態を計算する、ことが可能になった。また、虚時間発展計算には、グリーン関数のスパースモデリング法から得られる、非均一な虚時間メッシュを用いることで計算時間の短縮が可能である。

デモンストレーションとして、2次元ハバード模型のDMFT計算から得られた量子不純物問題（1不純物軌道+3バスサイト）に対して、量子回路シミュレータ Qulacs を用いた計算を行った。厳密なグリーン関数を精度良く再現することを確認した。一方、虚時間グリーン関数の計算には、異なる量子状態間の内積を繰り返し評価する必要があることを明らかにした。この実装には、現状ユニタリゲートが必要であり、NIQS実機での計算にはより効率的な実装技術の開発が必要である。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Hybrid quantum-classical algorithm for computing imaginary-time correlation functions”,
Rihito Sakurai, Wataru Mizukami, Hiroshi Shinaoka, to appear in Physical Review Research