

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

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

2021年度は、NISQ上での実行が難しい長時間の量子多体系の実時間ダイナミクスシミュレーションを実行するための手法の研究開発を行なった。その方法として、シミュレーションを実行したい時間領域をNISQ上で安定して実行可能と考えられる時間毎に分割し、それぞれ独立にシミュレーションを実行することで、NISQ上でより長時間のシミュレーションを実現することを目指した。分割した時間領域でのシミュレーションから連続したシミュレーションを実現するためには分割した時刻に完全系を挟むことで実現する。ただし、この完全系の次元は量子ビットの数に対して指数関数的に増加するため、実際に扱える量子ビット数に強い制限がかかる。そこで、最適化パラメータを含む量子回路による情報圧縮と量子状態を適切に測定する手法により、古典計算機上で現実的に取り扱える情報量の範囲内で完全系の導入に代わる手法の開発を試みた。最適化パラメータを含む量子回路は、限られた数の基底の係数が優位な係数を持つようコスト関数を設定し、設定した量子回路の範囲内でこのコスト関数を最小化するように最適化を行うことで実現した。また、多体の量子状態の測定では、1量子ビットのブロッホ球での x, y, z 成分に対する測定を多量子ビット系に拡張することで実現した。測定結果を元に、最適化パラメータを含む量子回路の逆変換に対応する量子回路を用いることで元の量子状態に復元し、その上で次の時間領域のシミュレーションを実行する。本手法による時間に対して分割された実時間シミュレーションは、時間を分割しない実時間シミュレーションによる結果と良い一致を示し、この手法の有効性が確認された。また2020年度に開発したスーパーコンピュータ「富岳」での利用を念頭に置いたDMRG法による量子多体系のダイナミクスシミュレータは強相関電子系のダイナミクスをはじめとした研究¹⁻⁴⁾に応用し、研究成果を論文等で発表した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Density-matrix renormalization group study of optical conductivity of the Mott insulator fortwo-dimensional clusters”, Physical Review B, vol. 104, No. 20, pp. 205123 (1-9), 2021.
- 2) “Numerical simulations of spectroscopic properties in o-dimensional Mott insulator”, Journal of Physics: Conference Series, vol. 2207, No. 1, pp. 012028 (1-6), 2022.
- 3) “Resonating dimer-monomer liquid state in a magnetization plateau of a spin- 1 2 kagome-strip Heisenberg chain”, Communications Physics, vol. 4, No. 1, 1-7, 2021.
- 4) “Magnetic phase diagrams of the spin-1/2 Heisenberg model on a kagome-strip chain: Emergence of a Haldane phase”, Physical Review B, vol. 104, No. 22, 224417, 2021.
“Precursory Research for Embryonic Science and Technology”, Journal of JST, vol. 1, No. 1, pp.1-10, 2021.