

令和 5 年 6 月 8 日現在

機関番号：12602

研究種目：若手研究

研究期間：2020～2022

課題番号：20K14377

研究課題名（和文）強くエンタングルした状態の数値シミュレーション：行列積表現によるサンプリング

研究課題名（英文）Numerical simulations of strongly entangled states: Sampling by matrix product states

研究代表者

後藤 慎平 (Goto, Shimpei)

東京医科歯科大学・教養部・プロジェクト助教

研究者番号：90754739

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：行列積状態と乱択サンプリングを組み合わせることで、従来手法の長所を併せ持つ有限温度量子多体系の数値シミュレート手法の開発に成功した。またその過程において、量子計算機場での生成が容易であることが期待できる有限温度量子多体系の効率的なシミュレートを行うのに十分なランダム性を持つ量子状態の生成方法を発見した。これらの研究成果は現在の古典計算機を用いた量子多体系のシミュレーション技術を向上させ、および将来の量子計算機を用いたシミュレーションに対して有用な知見を与えることが期待できる。

研究成果の学術的意義や社会的意義

量子多体系の有限温度の数値シミュレーションは化学反応や物質の性質を理解するために非常に有用である。その基礎技術を向上させていくことにはもちろん社会的な意義があるし、また有限温度系の理解を深めるという意味でも学術的な意義がある。また古典計算機のための数値シミュレーションの改良から量子計算機でも有用なことが期待されるシミュレーション手法へとシームレスに発展させることができた。量子計算機の実装が社会的な注目を集めている現況では、量子計算機上で動く可能性があるシミュレーション手法の提案も学術的意義および社会的意義がある。

研究成果の概要（英文）：We developed an efficient numerical approach to simulate quantum many-body systems at finite temperatures by combining matrix product states and the random sampling approach. The developed approach has advantages which are present in previous approaches. Besides, we also found the class of random quantum states which would be easily prepared in quantum computers. The quantum states possess enough randomness to efficiently simulate quantum many-body systems at finite temperatures. These results have developed the techniques of simulating quantum many-body systems at finite temperatures on classical computers, and would give useful insight to design an algorithm for simulating quantum many-body systems at finite temperatures on quantum computers.

研究分野：量子多体系

キーワード：有限温度量子多体系 数値シミュレーション 行列積状態 ランダム量子状態 量子ダイナミクス

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

量子状態をコンピュータなどの古典的なリソースで記述することは一般的には難しい。しかしながら一部の量子状態の中には行列積状態と呼ばれる表現方法によって効率的に表示することが可能となる。こうした行列積状態によって表現可能な量子状態の持つ重要な性質として、エンタングルメントエントロピーというある種の量子性の指標が系の大きさに対して比例せず、せいぜい対数的にしか増加しないというものがある。例えば、空間一次元系の基底状態がそのような状態にあたる。

逆に言えば、そのような性質を持たず、エンタングルメントエントロピーが系の大きさに比例するように増加する系は行列積状態で記述することが難しい。この困難は例えば有限温度系の量子状態を純粋状態によって記述しようとするとき現れる。一つの行列積状態で記述することが難しい状態の性質であっても、乱択サンプリングと組み合わせることで古典的なリソースを用いてシミュレートできる量子系の範囲を広げることが可能となるかもしれない。このような考えに基づき、この研究を開始した。

2. 研究の目的

行列積状態と乱択サンプリングを組み合わせることにより、従来の計算手法よりも適用範囲が広く、またより良い性質を備えた量子多体系のシミュレーション手法を開発すること、またその手法の性質について明らかにすることがこの研究の目的である。

3. 研究の方法

コンピュータを用いた数値計算手法の開発とその性質の解析が主な研究手法となる。より具体的には行列積状態を用いて量子状態を表現することで 100 オーダーの自由度からなる量子多体系のシミュレーション手法を考案した。また乱択サンプリングを行う場合には Markov 連鎖と呼ばれる重点サンプリング機構を組み込むことが多いが、あえてそうした機構を組み込まなかった。この状況でも有効なサンプリングができる場合には、この選択は理想的な並列効率という利点を開発手法にもたらす。

4. 研究成果

行列積状態と乱択サンプリングを組み合わせ、Markov 連鎖なしで空間一次元有限温度量子多体系の物理量を数値シミュレートする手法を確立した。行列積状態を用いて有限温度の量子多体系を数値シミュレートする手法は既にいくつか提案されている(引用文献 1, 2)。こうした手法のうち、文献 1 で提案されている手法は Hilbert 空間を拡張することにより混合状態で表される有限温度状態を純粋状態で表現している。この手法の長所は一度の計算で様々な温度での情報を得られるという点にある。しかしながら Hilbert 空間の拡張のために梯子系などの擬一次元系に対する適用が難しくなるという短所が存在する。一方、文献 2 で提案されている手法では混合状態を純粋状態の乱択サンプリングという形で表現している。このために Hilbert 空間の拡張が必要なく、適用範囲は文献 1 のものよりも広い。しかし乱択サンプリングを成立させるために Markov 連鎖を導入しており、異なる温度での情報を得るためには計算を全てやり直す必要がある。

本研究で提案した手法は、これらの手法の長所の両方を備えたものになっている。つまり純粋状態の乱択サンプリングを用いるため適用範囲は広く、Markov 連鎖が組み込まれていないため同じシミュレーションで幅広い温度領域の情報を一度に得ることができる。

提案手法では Markov 連鎖なしで有効な乱択サンプリングを実現させるため、thermal pure quantum state 法(引用文献 3)のアイデアを用いている。初期状態が Haar random 状態と呼ばれる非常にエンタングルした状態であれば実質的にサンプリングを行う必要がなくなる。しかしそのような状態は量子計算機上であっても大きな系では用意できないと考えられている。そこで時間発展演算子の近似である Trotter ゲートを初期状態に作用させ、行列積状態でも取り扱える程度にエンタングルさせてみた。するとわずかにエンタングルした状態から始めても有効な乱択サンプリングを実行することに成功した。

いくつかの一次元スピン模型と擬一次元スピン模型に適用してそのサンプリング効率を評価し、また従来手法を用いた結果との比較を行うことにより、提案手法が想定通りに機能していること、また文献 1 で提案されている手法よりも適用範囲が広いことを確認した。以上の成果は Physical Review B 104, 045133 (2021) にて発表している。

提案手法を古典リソースにより実行する場合には初期状態の持つエンタングルメントに制限をかける必要がある。一方でこの手法は量子計算機上でも実行できる可能性がある。その場合には初期状態に関する制限は、Trotter ゲートを作用させる回数スケールに置き換わる。量子計算機を用いても Haar random 状態を用意することは難しいので thermal pure quantum state 法と全く同じことを実行することは大規模系では現実的ではない。作用させる Trotter ゲートの深さを系の大きさに対して線形でスケールするという条件の下で提案手法は thermal pure quantum state 法にどれだけ近づけるか、数値シミュレーションから調べた。なおこの研究については用意される状態は非常に強くエンタングルしており行列積状態を用いる優位性はないため、厳密対角化法をベースとした方法により計算を行っている。

提案手法において Trotter ゲートを可積分模型から得られるものと、非可積分模型から得られるものそれぞれについて、サンプリング効率のシステムサイズ依存性を調べた。すると非可積分模型から得られた Trotter ゲートでは系の大きさと共にサンプリング効率が増加していき、一方で可積分模型の場合にはそのような増加は見られなかった。

Thermal pure quantum state 法の特徴的な点は、サンプル依存性のシステムサイズ依存性にある。すなわち系が大きくなるに従い、乱択サンプリングのサンプル依存性が小さくなっていき、十分大きな系においては単一のサンプルが有限温度の量子状態を与える様々な熱力学量を与える。サンプリング効率がシステムサイズと共に増加していくという事実は、提案手法においても thermal pure quantum state 法と同様に十分大きな系では単一のサンプルについて調べれば良いことを示唆している。特に Trotter ゲートを縦横磁場 Ising 模型から作った場合にはサンプリング効率のシステムサイズ依存性は調べた範囲で提案手法と thermal pure quantum state 法でほぼ一致した。以上の提案手法に対する Trotter ゲートの可積分性の影響についての観察は Physical Review B 107, 024307 (2023) にて発表した。

初めは手法開発を目指した研究であったがその過程においてランダム量子状態を効率よく作成する方法を発見し、そちらの当初は予期していない方向への発展も見られた。Haar random 状態は理論的な評価が行いやすいためによく用いられる仮定ではあるが、実際に準備することは困難である。今回の研究過程で見つけたランダム状態は準備が容易で、厳密な評価などは行ってはいないものの観測できる範囲では実用上十分なランダム性を有しているように見える。また系のサイズと同程度の実数によって量子状態を特徴づけることが可能であるため、同じ量子状態を複数用意することも容易にできる。このことは物理量の期待値を評価する際の並列性という観点から有利である。本研究は古典計算機向けの数値シミュレーションの開発から始まったが、そこで得られた知見は量子計算機向けのシミュレーション手法を考案する際にも役立つことが期待できる。

引用文献

- 1 Adrian E. Feiguin and Steven R. White, Physical Review B 72, 220401 (2005)
- 2 E. M. Stoudenmire and Steven R. White, New Journal of Physics 12, 055026 (2010)
- 3 S. Sugiura and A. Shimizu, Physical Review Letters 111, 010401 (2013)

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計5件（うち査読付論文 5件／うち国際共著 0件／うちオープンアクセス 5件）

1. 著者名 Goto Shimpei, Kaneko Ryui, Danshita Ippei	4. 巻 107
2. 論文標題 Evaluating thermal expectation values by almost ideal sampling with Trotter gates	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 24307
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/physrevb.107.024307	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Goto Shimpei, Kaneko Ryui, Danshita Ippei	4. 巻 104
2. 論文標題 Matrix product state approach for a quantum system at finite temperatures using random phases and Trotter gates	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 45133
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/physrevb.104.045133	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Asai Shiono, Goto Shimpei, Danshita Ippei	4. 巻 2022
2. 論文標題 Transition between vacuum and finite-density states in the infinite-dimensional Bose-Hubbard model with spatially inhomogeneous dissipation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Progress of Theoretical and Experimental Physics	6. 最初と最後の頁 033101
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1093/ptep/ptac011	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Goto Shimpei, Danshita Ippei	4. 巻 2
2. 論文標題 Minimally entangled typical thermal states algorithm with Trotter gates	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 43236
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevResearch.2.043236	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Kunimi Masaya, Nagao Kazuma, Goto Shimpei, Danshita Ippei	4. 巻 3
2. 論文標題 Performance evaluation of the discrete truncated Wigner approximation for quench dynamics of quantum spin systems with long-range interactions	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 13060
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.3.013060	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

[学会発表] 計6件(うち招待講演 0件/うち国際学会 2件)

1. 発表者名 Shimpei Goto, Ryui Kaneko, Ippei Danshita
2. 発表標題 Efficient Sampling Scheme with Trotter Gates for Evaluating Thermal Expectation Values on Quantum Computers
3. 学会等名 American Physical Society March Meeting 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Shimpei Goto, Ryui Kaneko, Ippei Danshita
2. 発表標題 Improving Sampling Efficiency of Quantum Computation of Many-body Systems at Finite-Temperatures by Ergodic Dynamics
3. 学会等名 29th International Conference on LOW TEMPERATURE PHYSICS (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 後藤慎平, 金子隆威, 段下一平
2. 発表標題 ランダムサンプリングを用いたトレース評価の効率の改善とそのシステムサイズ依存性
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 後藤慎平, 金子隆威, 段下一平
2. 発表標題 ランダム行列積状態を用いた有限温度量子多体系の数値解析手法：エンタングルメントによるサンプリング効率の改善
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 後藤慎平, 段下一平
2. 発表標題 最小エンタングルメント典型熱状態アルゴリズムにおける自己相関問題のTrotterゲートを用いた解消法
3. 学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 後藤慎平
2. 発表標題 Minimally entangled typical thermal states法における自己相関問題の解消
3. 学会等名 物性研究所短期研究会 「量子多体計算と第一原理計算の新展開」
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

https://github.com/ShimpeiGoto/RPMPs-T

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------