

# 時間依存密度行列繰り込み群法による量子アニーリングシミュレータの開発

— 古典コンピュータで加速する量子コンピュータ開発 —

柚木清司(理研)  
曾田繁利(理研)



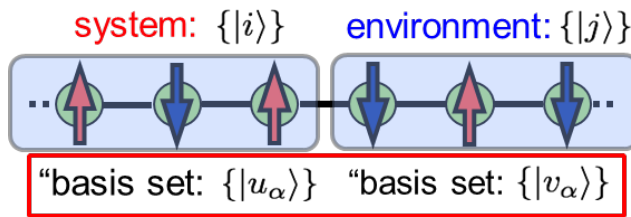
## 「世界初の大規模量子アニーリングシミュレータ」

### 背景

- 半導体の微細化技術の限界 → コンピュータはこれ以上速くならない？
- その回答のひとつが量子コンピュータ。
- 量子アニーリング: 組み合わせ最適化問題に特化した量子コンピュータ。
- 量子アニーリングの詳細を明らかにするシミュレータは存在しない。

### 目的

- 密度行列繰り込み群法による量子アニーリングシミュレータを開発。
- HPC利用も含めたシミュレーションを実行することにより量子アニーリングに基づく量子コンピュータ開発を加速させる。



密度行列繰り込み群法の概念図

### 開発したソフトウェアの特徴

- ハードウェア開発者や本分野の研究者に向けたソフトウェア。
- (動的・時間依存)密度行列繰り込み群法による機能を実装。
  - エネルギーギャップ。
  - 各種物理量。
  - 現在の量子アニーリングマシンには実装されていない相互作用等。
- 多数の量子ビットを取り扱うためにメモリ消費を抑えたアルゴリズム。

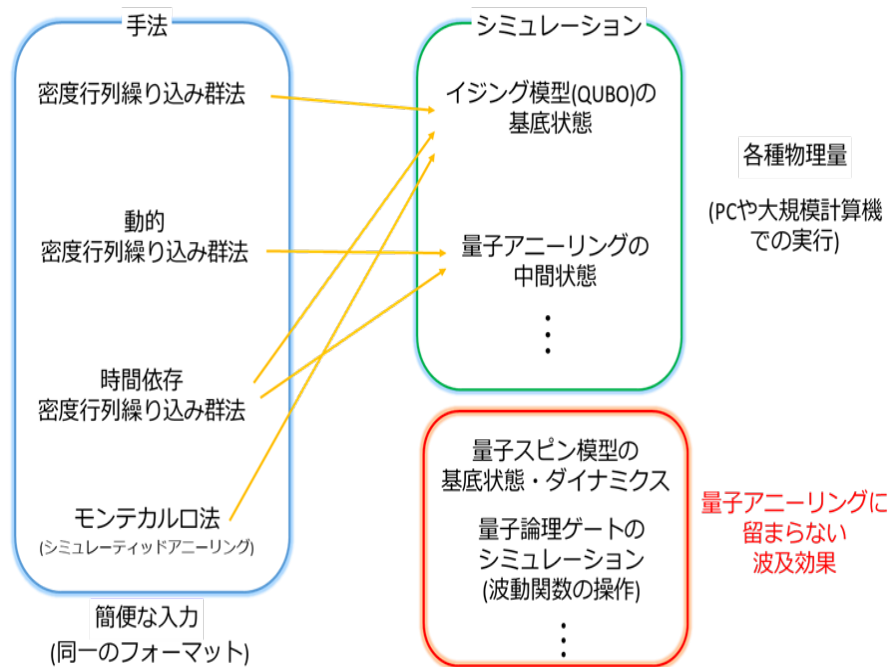
### 解決する課題と社会への影響

- 量子アニーリング技術の進歩の加速。
- より安定した量子アニーリングを実現。
- 大きな量子ビット数を備えた量子コンピュータによる広範な産業応用等。



D-Wave

<http://dwavejapan.com/system/>



## ソフトウェアの概要

```
# DMRG parameters
(DMRG truncation number) = 200
(number of sweep) = 5
```

```
# system parameters
(up-spin) = *
(down-spin) = *
```

## 入力データの例

開発したソフトウェアは広く一般に公開しています。

詳しくは、<https://www.r-ccs.riken.jp/labs/cms/DMRG/QUARTZ.html>

## 開発したソフトウェアの特徴

- プロジェクト参加者らのこれまでの密度行列繰り込み群法プログラムの開発経験から作成された高速かつ省メモリ使用量による実行が可能。
- 密度行列繰り込み群法に基底状態計算に加え、動的密度行列繰り込み群法による励起状態、エネルギーギャップの計算が可能。
- 新たに開発した手法である多次元系に対応した時間依存密度行列繰り込み群法による量子アニーリングの実時間シミュレーションが可能。
- 任意の物理量をプログラムの改変なく計算可能。
- 取り扱う系に対する柔軟な拡張性。
- 密度行列繰り込み群法を取り扱ったことのない利用者でも簡便に実行可能なデータ入力フォーマット。
- 計算の比較・検証のため、同一のデータ入力フォーマットから実行可能なモンテカルロ法によるシミュレーテッドアニーリングを実装。
- 大規模並列計算へ対応したソフトウェア。
- GPUを利用した計算へも対応。
- 波動関数に任意の演算子を作用させることも可能であることから、量子論理ゲート方式の量子コンピュータのシミュレータとしても利用可能。
- 一般的な量子スピン系の研究にも利用可能。

# QUARTZ

QUARTZ is a time-dependent density matrix renormalization group (DMRG) program for quantum computing simulations.

(ソフトウェア、Webページ共に逐次アップデート予定)