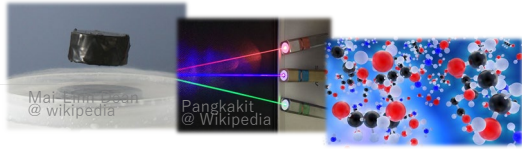


# テンソルネットワーク×量子計算機による量子物性シミュレータ

— 少数Qubitで探る ∞ 自由度の海に潜む特徴的状态 —

上田宏(理研R-CCS)  
大塚雄一(理研R-CCS)  
中田真秀(理研)

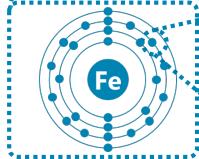
## 背景



全部まとめて

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H\Psi$$

で理解&設計したい!



スピン1個の場合

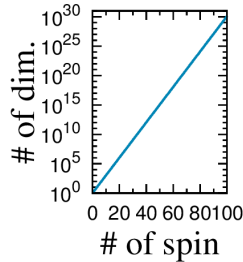
2次元ベクトルで  
状態が表現できる!

量子多体系 × 古典計算機

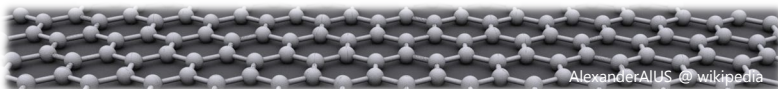
スピンを1つ増やす ≡ **倍の計算資源**

量子多体系 × 量子計算機

スピンを1つ増やす ≡ **Qubitを1つ増やす** → 計算資源コスト  $O(2^N) \rightarrow O(N)$



実際の物質: **無限個**の電子スピンの物性に寄与



## 目的

量子計算機の優位性を活用した  
量子物性シミュレータの開発



VQE (Variational Quantum Eigensolver)

## 社会的価値

量子物性現象の高精度シミュレーション

基礎科学の発展 において必要不可欠

新奇物性現象発見 のための 基盤技術 の提供

日本 の基礎科学分野における 国際競争力の向上

ポストムーア時代に必要となるアルゴリズム開発

古典計算機 と 量子計算機 の 協奏

## 特色

分散メモリ型並列計算による量子回路シミュレータの高速化

テンソルネットワーク法の導入

➡ 有限個のQubit で 無限個のスピン が取り扱える

Adapt VQE + SSVQE による電子系の高精度計算

# テンソルネットワーク×量子計算機による量子物性シミュレータ

— 少数Qubitで探る  $\infty$  自由度の海に潜む特徴的状态 —

上田宏(理研R-CCS)  
大塚雄一(理研R-CCS)  
中田真秀(理研)

## 開発した量子回路シミュレータと性能評

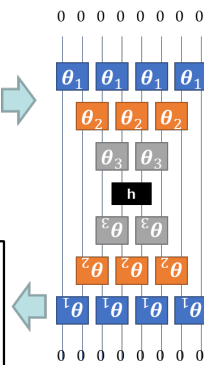
実装言語: Fortran90  
並列環境: MPI + OpenMPのハイブリッド並列  
コンパイラ: 富士通/Intel系Fortranコンパイラ  
ライブラリ: スレッド並列版BLAS  
機能: 2-qubit演算の繰り返しによる任意の量子状態

入力情報:

```
#---- Input.dat ---
8 # 全qubit数
1 2 1 # i = 1, j = 2,  $\theta_1$ 
3 4 1 # ...
5 6 1
7 8 1
2 3 2
4 5 2
6 7 2
3 4 3
5 6 3 # i = 5, j = 6,  $\theta_3$ 
4 5 0 # ボンドエネルギーを
# 評価するサイト

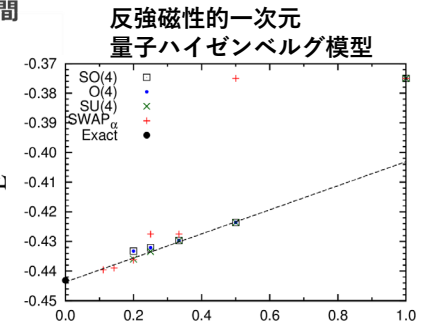
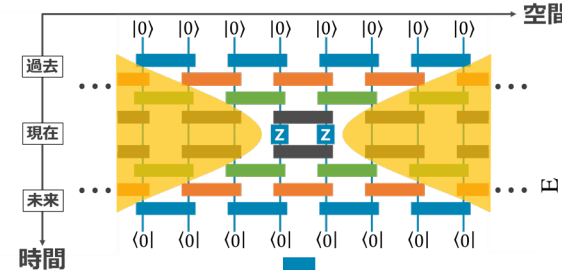
#-- theta_SU4.dat --
 $\theta_{1,1} \theta_{1,2} \dots \theta_{1,15}$ 
 $\theta_{2,1} \theta_{2,2} \dots \theta_{2,15}$ 
 $\theta_{3,1} \theta_{3,2} \dots \theta_{3,15}$ 

出力情報:
#-- output.dat ---
<XX> = 0.05 ...
<YY> = 0.10 ...
<ZZ> = 0.20 ...
Elapsed time: 0.123 [sec]
```

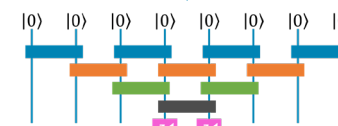


## テンソルネットワークによる無限系量子スピン系の解

### 並進対称性と因果円錐に基づく最小回路構成



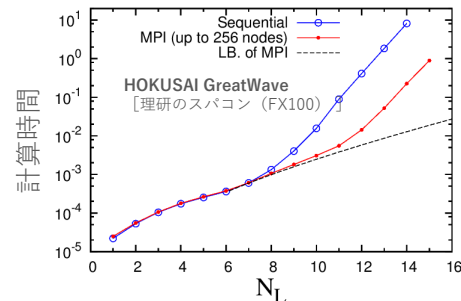
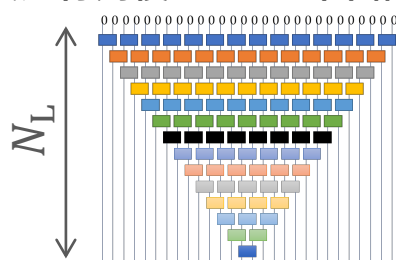
実際の回路



$1/N_L$   
厳密解:  $-0.44317 \dots$   
外挿値:  $-0.4436(8)$   
推定精度: 約 99.8 %

## Adapt VQE + SSVQE による高精度計算

### 1次元行列積ユニタリ回路



28 qubit系で 256 ノード並列で約 36 倍速を達成

### 2x2 Hubbard 模型

電子数: 4  
 $U/t = -3.0$   
 $E_0 = -8.4244258$  [Adapt VQE]  
 $-8.4244289 \dots$  [厳密解]  
 $U/t = -4.0$   
 $E_0 = -10.1027464$  [Adapt VQE]  
 $-10.1027484 \dots$  [厳密解]

### Be原子

DZ基底 (4 分子軌道)  
 $E_0 = -14.58243$  a.u. [Hybrid VQE]  
 $-14.58269 \dots$  a.u. [厳密解]  
 $E_1 = -13.3139$  a.u. [Hybrid VQE]  
 $-13.3146 \dots$  a.u. [厳密解]  
STO-6G基底 (5 分子軌道)  
 $E_0 = -14.5560883$  a.u. [Adapt VQE]  
 $-14.5560885 \dots$  a.u. [厳密解]

化学精度 (0.0016 a.u) を達成