平成 29 年度　利用報告書

課題名（タイトル）：

二次元強相関系の量子ダイナミクスの研究

利用者氏名：曽田　繁利

理研での所属研究室名：計算科学研究機構　量子系物質科学研究チーム

１．　本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

強相関量子系の量子ダイナミクスは、系の内部自由度が独自の集団的量子効果のため、基礎科学的興味のみならず、次世代の科学技術への応用の立場からも注目されている。このような強相関量子系の量子ダイナミクスを理解するためには、その内部自由度を精密に取り扱う必要があるため、平均場近似に基づく解析的な取り扱いが困難であり、数値的手法による取り扱いが重要であると考えられている。また、数値的取り扱いにおいても、系の巨大な内部自由度を取り扱う必要性から、十分な大きさの系を取り扱うためには巨大な計算資源が必要とされる。特に、系の内部自由度は系の大きさに対して指数関数的に増大するため、厳密対角化法による取り扱いも限定される。そこで、本研究課題では特に低次元強相関系に対して非常に有効な密度行列繰り込み群法を応用し、強相関量子系の量子ダイナミクスを明らかにすることを目的とする。さらに、その科学的成果創出のため、密度行列繰り込み群法の大規模計算のために必要な大規模並列化と密度行列繰り込み群法を拡張した多次元の強相関量子系の量子ダイナミクスに対応可能な新たな数値的計算手法の開発も行う。

２．　具体的な利用内容、計算方法

本研究課題では、計算手法として密度行列繰り込み群法を基本とした計算手法を用いる。密度行列繰り込み群法は数値繰り込みの手法であり、特に一次元強相関系の研究対し最も強力な手法のひとつとして知られている。さらに、近年では計算機科学の発展により、二次元強相関系に対しても適用され、多くの研究成果が報告されている。また、密度行列繰り込み群法は系の基底状態のみならず、励起ダイナミクスや物理量の時間発展などの量子ダイナミクスを取り扱う手法として拡張されており、これは動的密度行列繰り込み群法や時間依存密度行列繰り込み群法として知られている。本研究課題では、二次元強相関系の量子ダイナミクスを取り扱うため、動的密度行列繰り込み群法、および時間依存密度行列繰り込み群法による研究を行う。しかしながら、密度行列繰り込み群法で多次元の強相関系を精密に取り扱うためには非常に巨大な計算コストを要する。具体的には、密度行列繰り込み群法の一次元強相関系の取り扱いでは、数千から数十万次元の行列の固有値問題で精密な計算が可能であったのに対し、二次元強相関系の取り扱いにおいては場合によっては十億次元を超える行列の固有値問題を取り扱う必要がある。したがって、このような場合では PC や研究室のクラスタマシンでの計算は非現実的であるため、HOKUSAI での計算を実行した。

３．　結果

本年度の本研究課題では、多次元強相関系に適用可能な時間依存密度行列繰り込み群法の開発を行った。この時間依存密度行列繰り込み群法については一次元強相関系について S. R. White らにより非常に効率的な時間依存密度行列繰り込み群法の計算手法が開発されており、その応用研究も報告されている。しかしながら、Suzuki-Trotter 分解を基本とするこれまでの時間依存密度行列繰り込み群法は、多次元系において任意の格子形状に対して適用する場合には、密度行列繰り込み群法のアルゴリズムの観点からも一部を除き非常に困難である。そこで、本研究課題の研究代表者らは、直交多項式展開法を用いた新たな時間依存密度行列繰り込み群法の研究開発を行ってきた。この手法では、動的密度行列繰り込み群法において、例えば基底状態とあるエネルギーの励起状態を同時に最適に表現するために用いられるマルチ・ターゲットの手法を時間依存密度行列繰り込み群法にも導入する。これにより、ある時刻とそこから任意の時間が経過した状態を最適に表現することが可能になり、多次元系にも適用可能な時間依存密度行列繰り込み群法が実現した。

そこで、本年度の課題としては、これまで開発を行

ってきたこの時間依存密度行列繰り込み群法をより高効率な手法に改良するため、これまでのマルチ・ターゲットによる取り扱いからただ一つの状態について基底を最適化するシングル・ターゲットの時間依存密度行列繰り込み群法への改良を試みた。シングル・ターゲットではただ一つの状態のみを表現するため、そのための基底の数 m を小さくすることが可能になることが期待される。特に、密度行列繰り込み群法の計算コストは $O(m^3)$で与えられることからもその効果が期待される。

まず、各密度行列繰り込み群法のステップ毎に時間を更新することにより、シングル・ターゲットを実現する手法を試みた。ここでは、ステップ毎に更新される時間の間隔を十分小さくし、時間の更新前と更新後の状態が十分近いことを仮定する。しかしながら、この方法では、系全体を一様に時間発展させることが困難であるため、精密な結果を得ることはできなかった。

そこで、新たに更新前と更新後の状態を精密に取り扱うため、更新前の状態を精密に表現する基底で張られる空間と、更新後の状態を精密に表現する基底で張られる空間の二つを用意し、それぞれ独立に基底の最適化を行う手法を試みた。図に一次元 Hubbard 模型における光学応答をテスト計算の例として、電流の時間依存性を、厳密対角化とこれまでのマルチ・ターゲットによる計算結果を示す。この系は厳密対角化との比較のため比較的密度行列繰り込み群法で計算が容易な一次元系における計算であるが、ここでは周期的境界条件を仮定し、その相互作用項の計算に多次元の密度行列繰り込み群法と同様の計算手法を用いている。まず、マルチ・ターゲットの場合は m=400 で厳密対角化の結果と良い一致が見られるが、m=300 の場合には、厳密対角化の結果とは異なっている。その一方、本研究のシングル・ターゲットの取り扱いでは m=100 でも厳密対角化と良い一致が確認される。

本研究における時間依存密度行列繰り込み群法の計算コストについては、計算量は二つの空間の間の基底を取り扱う必要があることからその間の基底変換に対して計算が必要である。しかしながら、この部分の計算量は密度行列繰り込み群法全体の計算量と比較して小さいため、全体の計算時間はほとんど変化しない。また、メモリ使用量については、二つの空間の基底の情報を保持する必要があることから、マルチ・ターゲットの場合と比較して二倍近く大きくなる。しかしながら、m に対して密度行列繰り込み群法におけるメモリ使用量は $O(m^2)$で与えられることから、実際の計算ではメモリ使用量に対してもシングル・ターゲットの方法の方が有利であると考えられる。

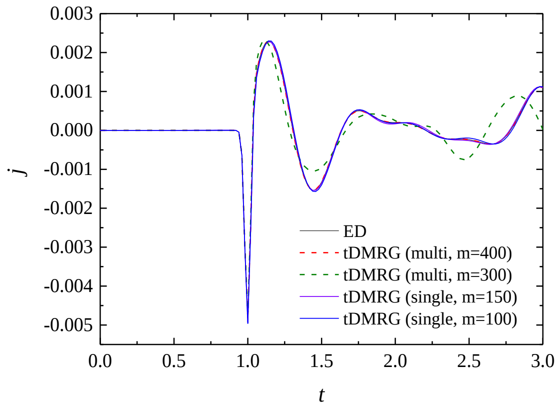

図 : 1 次元 Hubbard 模型における光学応答のテスト計算の例。電流の時間依存性について、厳密対角化 (ED) と本研究の時間依存密度行列繰り込み群法 (tDMRG) との比較を示す。

4．　まとめ

本年度の本研究課題では、多次元強相関系にも適用可能な時間依存密度行列繰り込み群法の研究開発を行った。特に、より効率的な計算を実現するため、密度行列繰り込み群法の計算コストを決める基底の数に対応する任意の密度行列繰り込み群法の打ち切り次数m に対しより小さい m で高精度の計算を実現するために、シングル・ターゲットへの改良を行った。単純なシングル・ターゲットへの拡張はうまくいかなかった。しかしながら、二つの時刻の状態を独立に最適化する手法では、マルチ・ターゲットの場合と比較して小さい m で高精度の計算が実現することが確認された。

5．　今後の計画・展望

本研究の時間依存密度行列繰り込み群法は、強相関量子系の実時間量子ダイナミクスを取り扱う手法として、特に系によらず適用できることから様々な応用が考えられ、実際にその応用研究もすでに進めている。また、本研究の計算手法は物性物理分野のみならず、量子情報分野など他分野への応用も期待される。

平成 29 年度　利用研究成果リスト

【国際会議、学会などでの口頭発表】

1. “動的・時間依存密度行列繰り込み群法の多次元系への応用”, 曽田繁利, CBSM2 サブ課題Ｄ「量子力学と情報」研究会, 2017/10, 東京大学.
2. “Development of time dependent DMRG method for higher dimensional systems and its application to quantum annealing”, S. Sota, T. Shirakawa, S. Yunoki, and T. Tohyama, APS march meeting 2018, 2018/3, Los Angeles.