

テンソルネットワーク(TN)スキームに基づく異分野融合型計算科学研究

理化学研究所計算科学研究センター 量子系物質科学研究チーム 柚木 清司

研究目標

自然科学は、その研究対象の広がりとともに細分化の歴史を辿ってきました。

例えば、素粒子物理学は物質の最小構成単位とその基本的相互作用を研究対象としますが、物質科学は物質の構造・性質などの巨視的性質を微視的な基本法則を用いて解明しようとする。また、生命現象を物理学・化学の基本法則から理解しようとする生命科学も自然科学の一分野です。たとえ諸分野の研究対象が異なっていたとしても、自然科学の本質は多体(多自由度)問題にあります。

一般的に、多体問題は理論的解析が困難であり、そのため自然科学の諸分野で数値的手法を用いた研究が発展してきました。テンソルネットワーク(TN)スキームとは、多体問題をTN形式によって定式化し、高精度解析を行う一群の理論的・数値計算手法的枠組みであり、2000年代以降幅広い分野で大きな注目を集めてきています。

本研究では、「富岳」を利用したTNスキームに基づく大規模計算によって、従来の数値計算手法では解決困難であった科学的課題に対する研究を推進していきます。

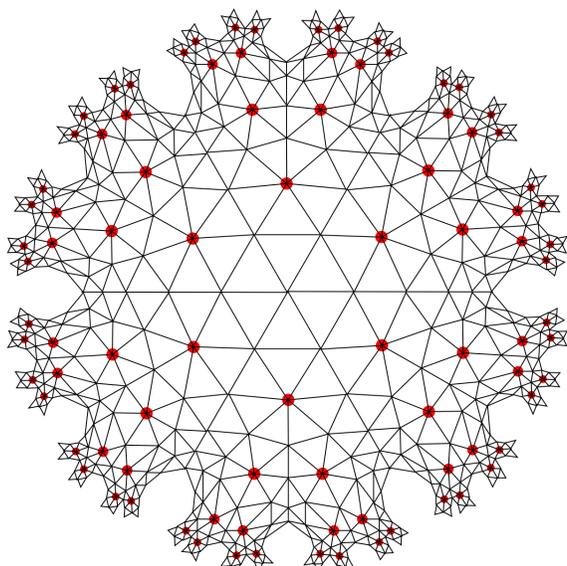
また、理研R-CCS、神戸大学、兵庫県立大学および大阪大学には、TNスキームを用いた計算科学研究を強力に推進していける人材が揃っており、4機関の研究者が連携することによって神戸地区に日本の中心的拠点を形成することを目指します。

期待される成果と波及効果

TNスキームは、TN形式によって定式化された多体問題に対する高精度な理論的・数値的解析手法であり、その定義から容易に推測できるように分野を越えた適用可能性を持っています。さらに、TNスキームは既存の数値計算アルゴリズムにない特筆すべき長所を持っています。一つは、モンテカルロ法における負符号問題(モンテカルロ法の理論的基盤となるボルツマンウェイトの正値性が保証されないモデルに対する数値計算上の困難)が存在しないこと、もう一つは、システムサイズに対する数値計算コストが対数的である(結果的に従来の計算よりも桁違いに大きな粒子数・体積の計算が可能となる)ことです。

モンテカルロ法はこれまで広汎に使用されてきた数値計算手法の一つであり、大きな成功を収めてきたことも事実ですが、負符号問題のために、科学的重要性が認識されながらも、ほぼ手つかずのまま取り残されている研究課題も多く存在します。例えば、素粒子物理学における有限密度QCDや格子超対称性の研究、また、物性物理・物質科学における2次元以上の強相関量子系に対する基底状態・励起状態、金属絶縁体転移や磁性・高温超伝導の研究が代表的なものとして挙げられます。さらに、近年、量子計算や機械学習においてもTN形式が注目されています。TNスキームでは、これらの重要な科学的課題に対して大きな進展をもたらすことが期待されています。

●双極(5,4)格子



●平面フラクタル

