

# 藤堂研究室

<https://exa.phys.s.u-tokyo.ac.jp/>

教授: 藤堂眞治 (Synge Todo)

特任講師: 大久保 毅 (Tsuyoshi Okubo)

助教: 諏訪秀麿 (Hidemaro Suwa)

特任研究員: 石井隆志 (Takashi Ishii)

D3: 足立大樹 (Daiki Adachi)

D2: 石川文啓 (Fumihiro Ishikawa)

山本卓矢 (Takuya Yamamoto)

D1: 中西 健 (Ken Nakanishi)

中野 颯 (Hayate Nakano)

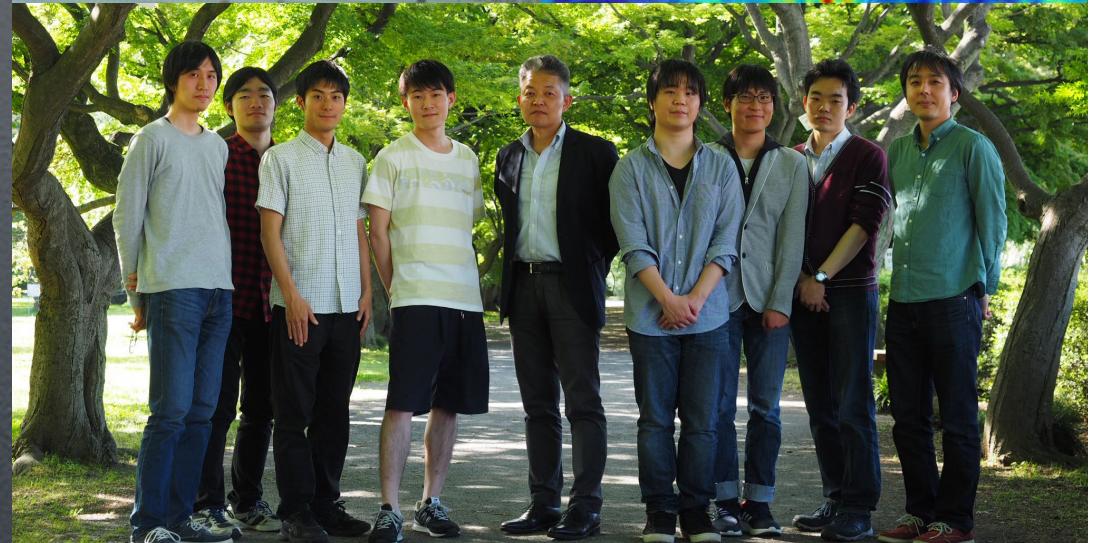
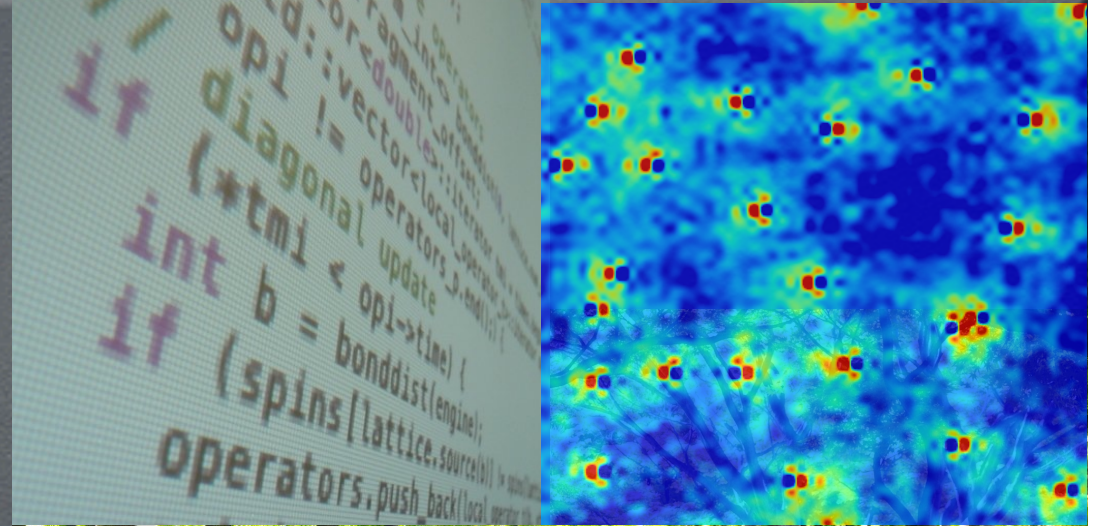
M2: 近藤千尋 (Chihiro Kondo)

M1: 曹睿泉 (Ruixiao Cao)

丸山義輝 (Yoshiki Maruyama)

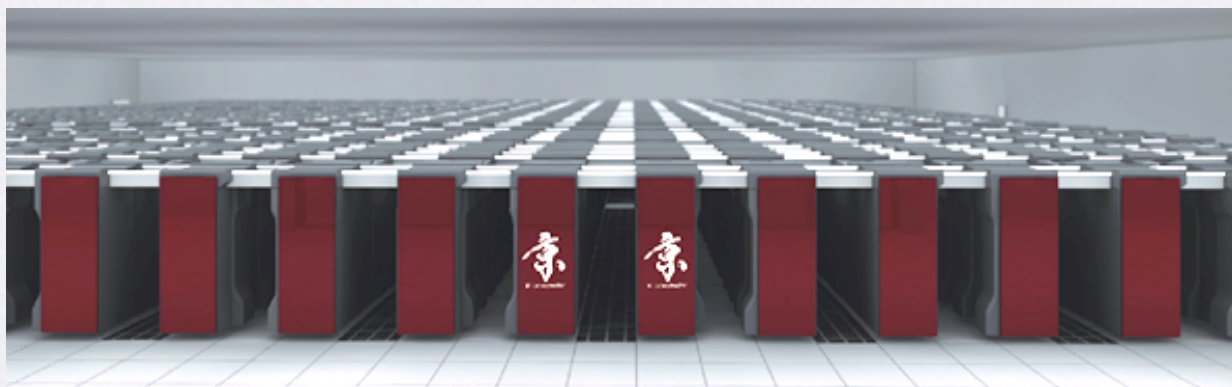
森下智之 (Tomoyuki Morishita)

研究生: 安炳国 (Byung-Guk Ahn)

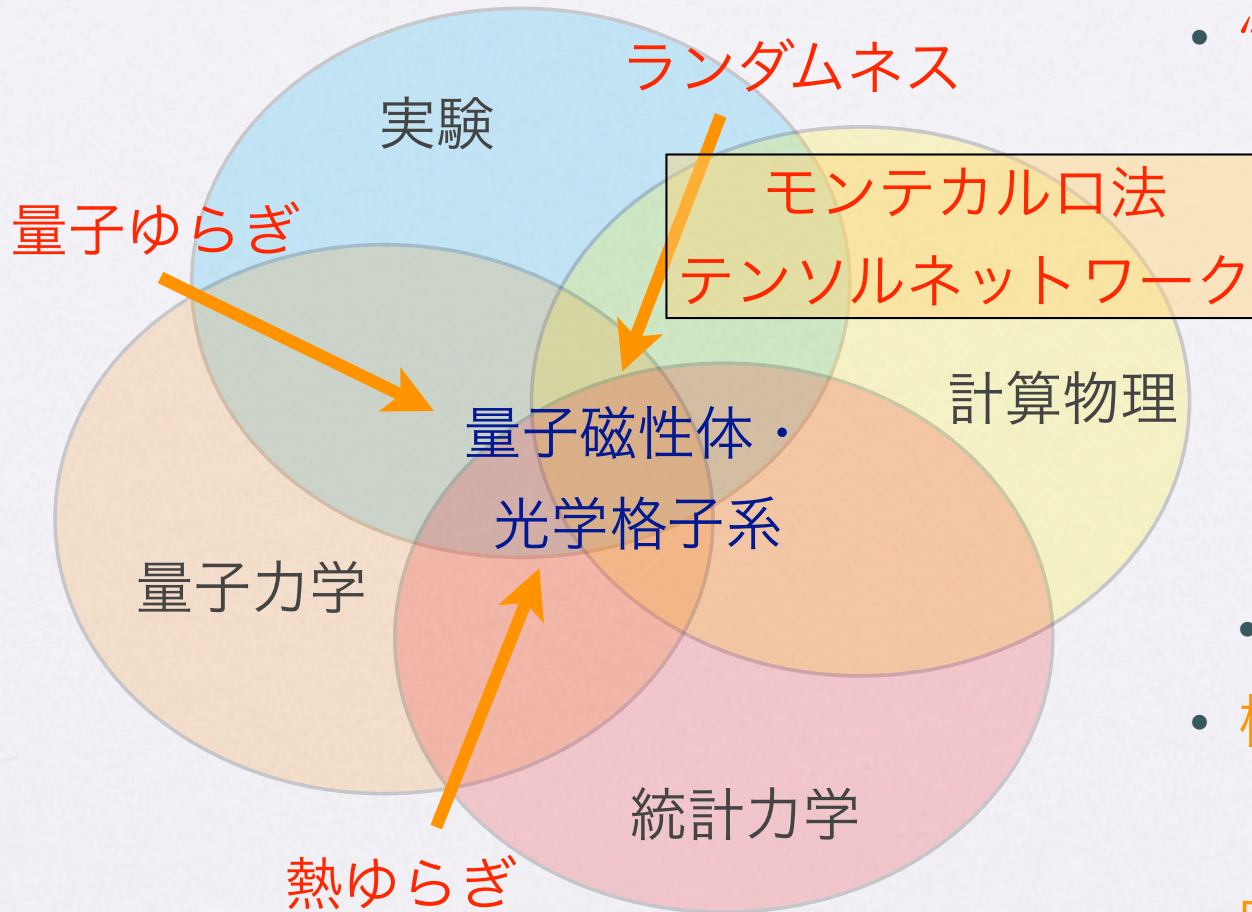


# シミュレーションで探る量子多体現象

- 強相関多体系における新奇な相・秩序の探索、相転移・臨界現象、非平衡系における動的な協力現象
- 量子多体系に対する新たなシミュレーション手法開発
- 統計的機械学習の物性物理への応用
- 最先端スパコンの能力を活かすための並列化手法の研究
- 次世代並列シミュレーションのためのオープンソース・ソフトウェアの開発



# 強相関多体系における新奇な状態の探索

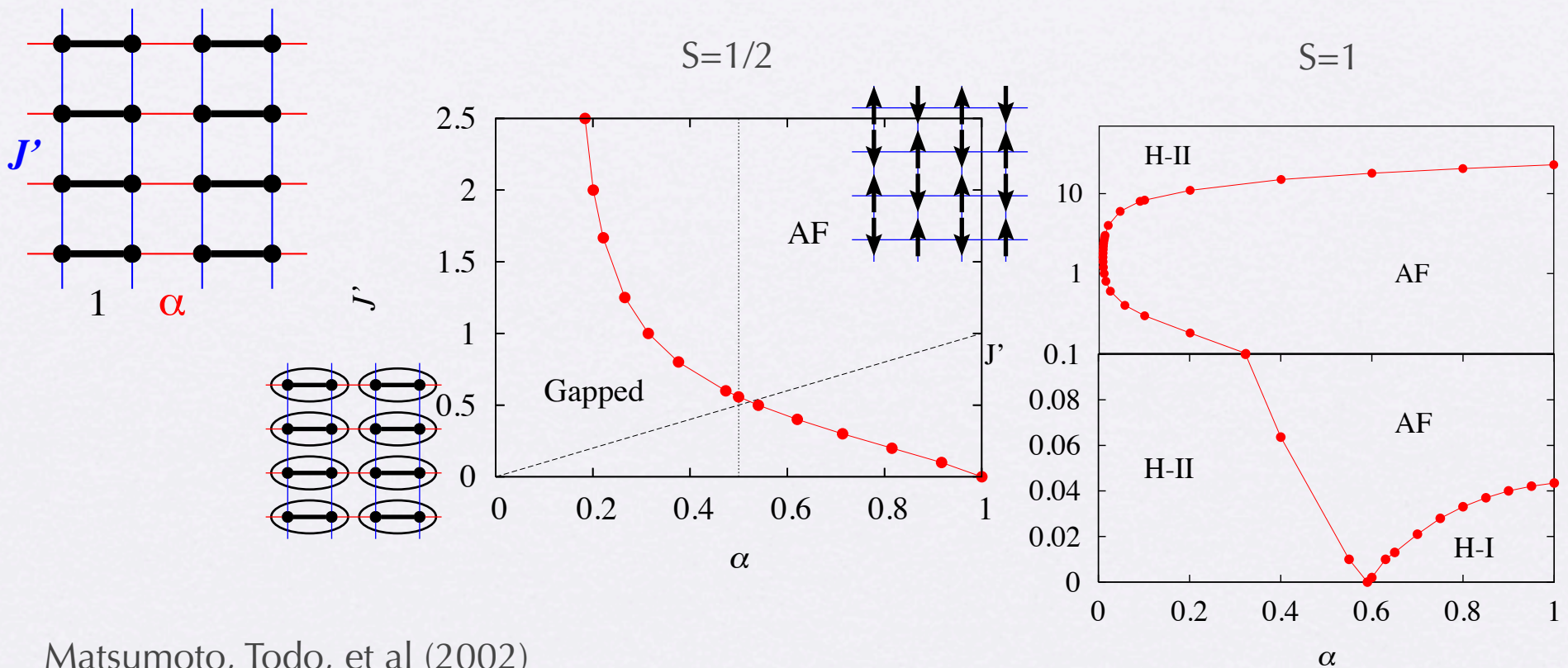


- “形”の効果とランダムネス
- 強い空間的異方性
- 端・表面の効果  
量子表面相転移
- 有限サイズ効果  
ナノ磁性体
- 長距離相互作用の効果
- 格子のゆらぎ  
フォノンとスピンの相互作用
- 空間・時間的非一様性  
輸送現象、非平衡状態

# Quantum phase transition in 2D HAF

- Quantum phase transition from spin-gapped state to AF-LRO phase

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \mathbf{S}_{2i,j} \cdot \mathbf{S}_{2i+1,j} + \alpha \sum_{i,j} \mathbf{S}_{2i+1,j} \cdot \mathbf{S}_{2i+2,j} + J' \sum_{i,j} \mathbf{S}_{i,j} \cdot \mathbf{S}_{i,j+1}$$

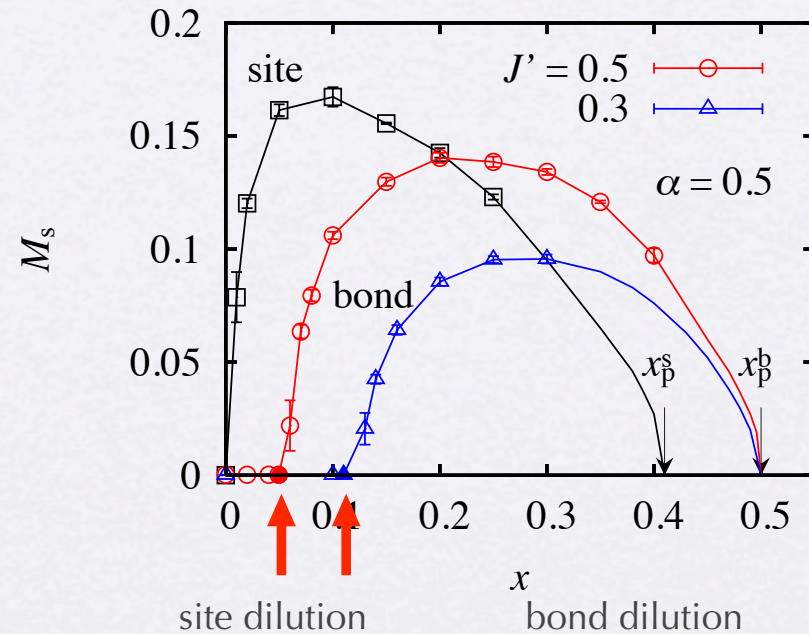
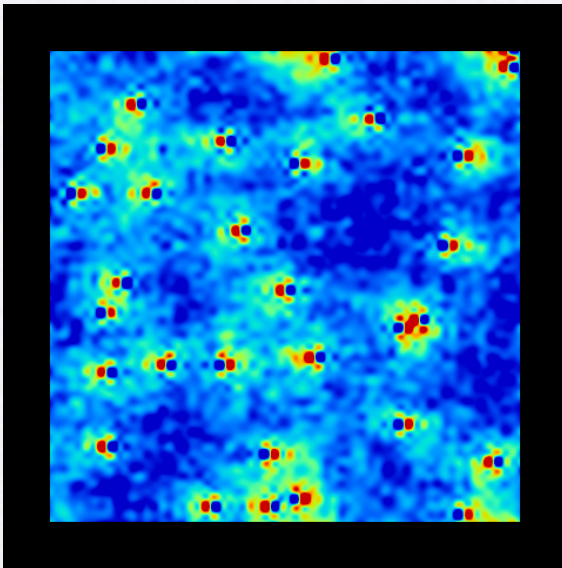


Matsumoto, Todo, et al (2002)

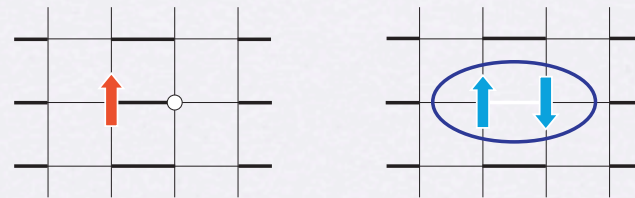
3D Heisenberg (classical O(3)) universality

# Impurity induced long-range order

- quantum fluctuations + impurities  $\Rightarrow$  long-range order!
- static dimerization + static impurities



- site or bond randomness
- spontaneous dimerization?
- quantum effects of phonons



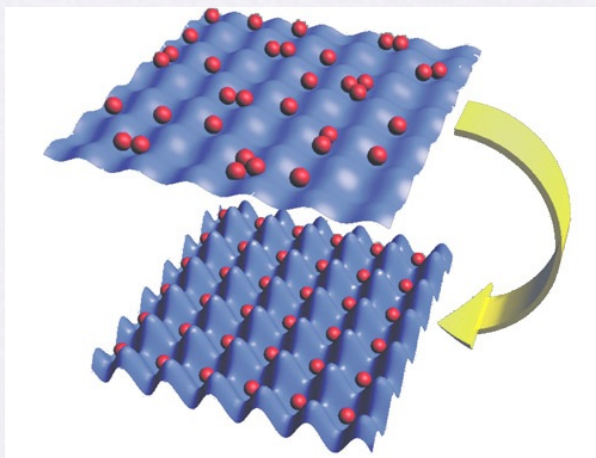
Yasuda, et al (2002), Yasuda et al (2006)

# Supersolid in extended Bose-Hubbard model

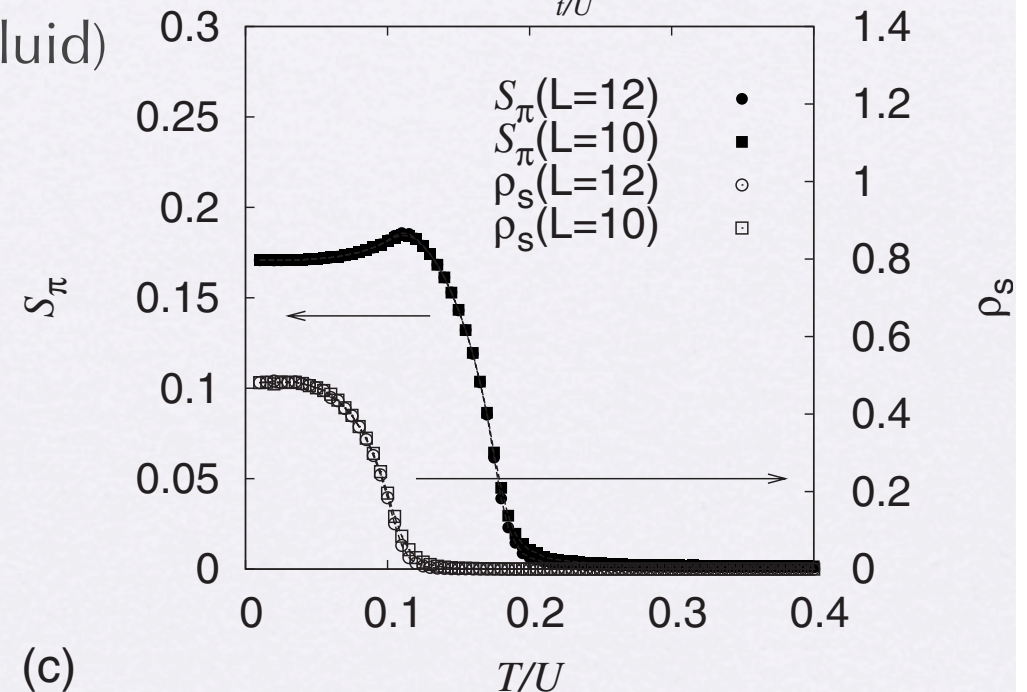
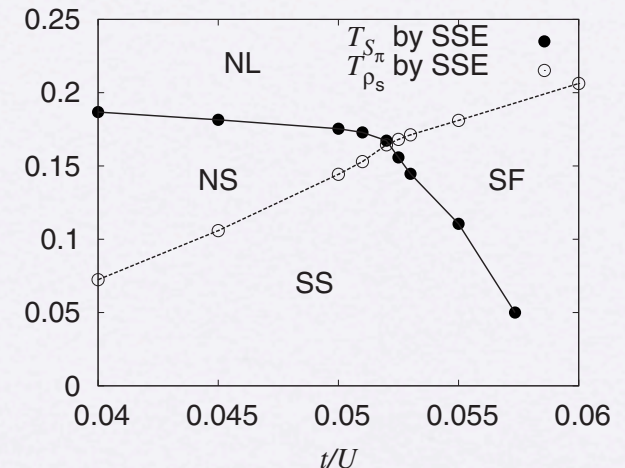
- Interacting soft-core bosons

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^\dagger a_j + a_i a_j^\dagger) + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j + \frac{1}{2} U \sum_i n_i (n_i - 1) - \mu \sum_i n_i, \quad T/U$$

- Supersolid = co-existence of diagonal long-range order (=solid) and off-diagonal long-range order (=superfluid)
- Experimental realization: optical lattice



<http://www.uibk.ac.at/th-physik/qo>

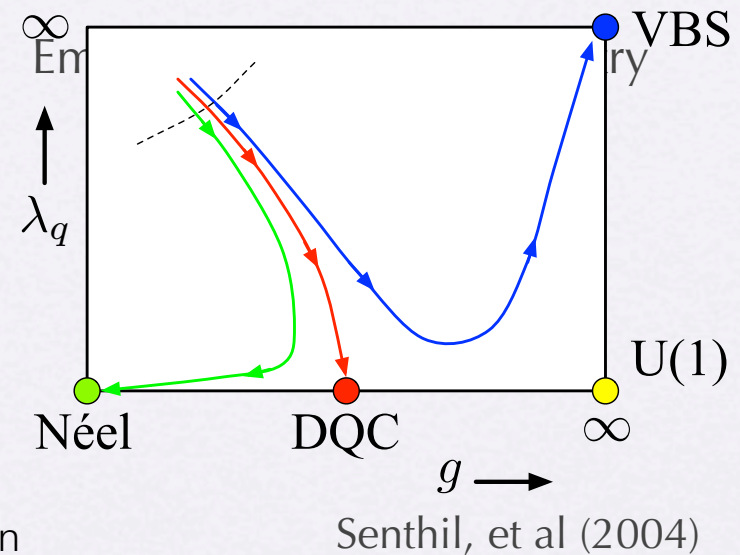
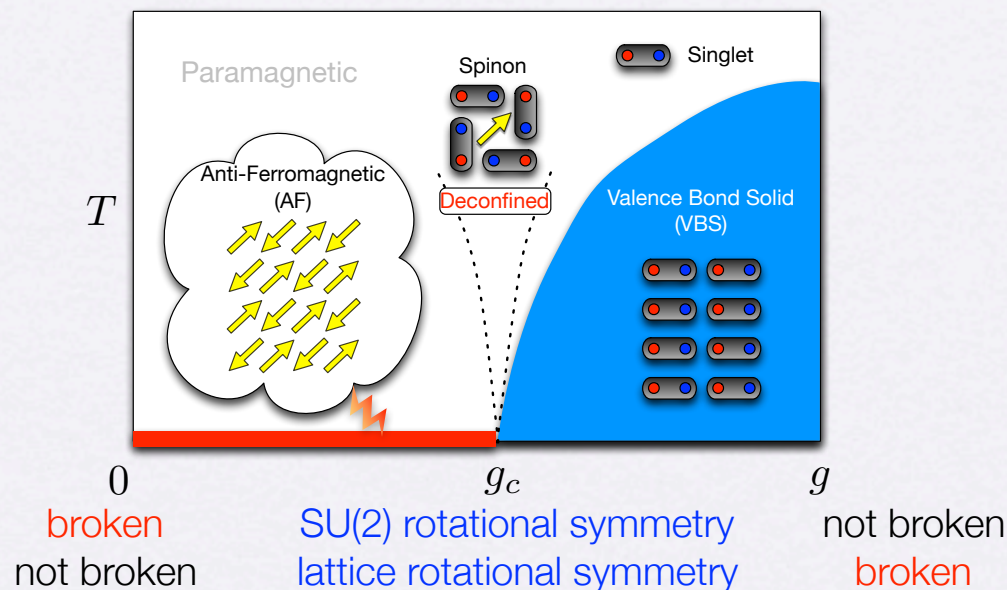


(c)

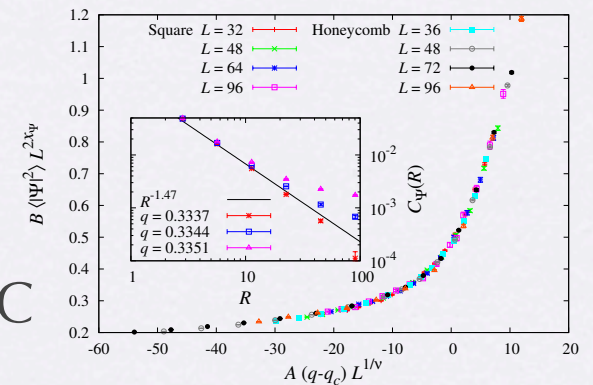
Yamamoto, Todo, Miyashita (2009)

# Deconfined critical phenomena

- Possibility of continuous phase transition between two symmetry broken phases  $\Rightarrow$  Novel critical phenomena due to quantum interference



- $SU(2)$  symmetric NCCP<sup>1</sup> model (Kukulov et al 2008)  $\Rightarrow$  weak 1st order?
- $SU(N)$  J-Q model (Lou et al 2009, Harada, 2013)  $\Rightarrow$  confirmation of DCP scenario by Large-scale QMC



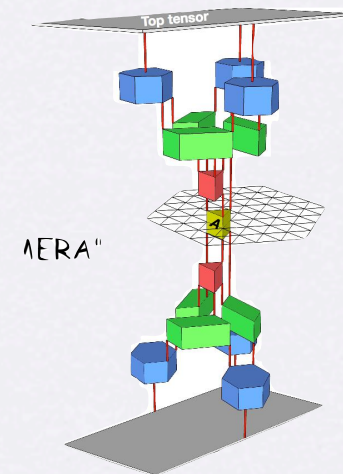
# 計算物理の階層

- どうモデル化するか？
- 問題の定式化、何を見るか？ 何を測るか？
- シミュレーション手法
- アルゴリズム、プログラム開発、実装
- 最適化、並列化
- より高性能なコンピュータ



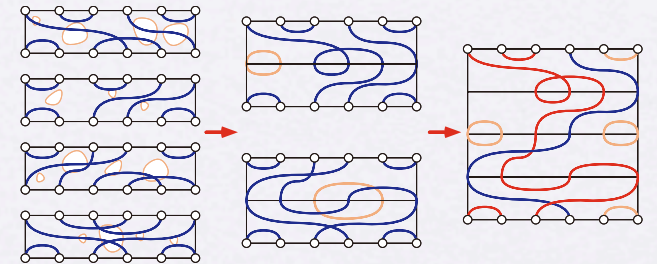
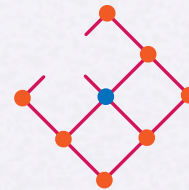
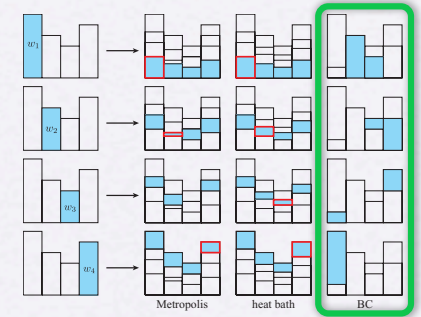
# 量子多体系に対するシミュレーション手法

- ヒルベルト空間の次元  $\sim$  系のサイズに対して指数関数的に増加
  - 全ての状態を厳密に扱うことは、スパコンを使っても困難
- 物理的に重要な性質を失うことなく、シミュレーションを実行しやすい形へ表現しなおすことが本質的
- 乱択アルゴリズム (randomized algorithm)
  - 虚時間経路積分+モンテカルロサンプリング = QMC
- 情報圧縮
  - 特異値分解による波動関数の低ランク近似  
= テンソルネットワーク
  - スパース(疎性)モデリング, LASSO



# 藤堂研で研究・開発しているアルゴリズム とオープンソースソフトウェアの例

- 古典/量子マルコフ連鎖モンテカルロ法 ([looper](#), [worms](#))
- 詳細つりあいを必要としないモンテカルロ法 ([BCL](#)ライブラリ)
- 長距離相互作用系に対する $O(N)$ 法
- 厳密対角化法
  - $H\Phi$  : 厳密対角化法による有効モデルソルバーパッケージ
  - [Rokko](#) : 大規模並列対角化ライブラリ
- [mptensor](#) : テンソルネットワーク
- [ALPS](#), [ALPS Core](#) : Applications and Libraries for Physics Simulations
  - 強相関量子格子模型のためのオープンソースソフトウェア
- [QuPy](#) : 量子回路シミュレータ
- [vqcopt](#) : 変分量子回路最適化ライブラリ
- [MateriApps](#) : 物質科学シミュレーションのポータルサイト
  - [MateriApps LIVE!](#) オープンソースソフトウェアを収録したライブLinux



# 大学院における研究テーマの例

- 異方性の強い量子磁性体における相転移の研究
- 長距離相互作用をもつ磁性体の研究
  - オーダーNモンテカルロ法の開発、磁気双極子相互作用の効果
- 新奇量子相の探求
  - 連続空間QMCの開発、表面吸着ヘリウム4の示す超固体状態
- 量子多体系におけるトポロジカルな秩序・エンタングルメントの研究
- 物質科学シミュレーションの基礎原理の研究
  - 詳細つりあいを必要としないモンテカルロ法、負符号問題
- 新しい量子多体シミュレーション手法の開発
  - 量子モンテカルロ法、テンソルネットワーク
- 量子コンピュータのための量子-古典ハイブリッドアルゴリズム
- 一般化ランジュバン方程式における異常拡散と非エルゴード性
- 機械学習における情報圧縮、物質科学シミュレーション・解析への応用
- 新しい最適化手法とその物質科学への応用

「研究ハイライト」 <https://exa.phys.s.u-tokyo.ac.jp/ja/projects/highlight>

# これまでの理論演習のテーマ例

- 特異値分解アルゴリズム
  - 乱択特異値分解(Randomized SVD)の実装とその性能検証
- 多体量子力学の基礎原理
  - 閉じた量子系の緩和機構 - ETH (Eigenstate Thermalization Hypothesis) とその数値的検証
  - 熱的量子純粋状態(Thermal Pure Quantum State)による量子統計の基礎付け
- 非平衡・非定常系
  - 非平衡量子系のテンソルネットワーク
- 機械学習・深層学習(Deep Learning)
  - 常微分方程式の解法、数値流体力学、加速器実験結果解析への応用、スピン系の励起スペクトルの推定
  - 制限ボルツマンマシンによる多体量子系の波動関数の解析
  - ニューラルネットワーク繰り込み群

# 2019年度理論演習I,II のテーマ案

- モンテカルロ法の新手法
  - Self-Learning Monte Carlo法と詳細釣り合いを満たさないモンテカルロ法の組み合わせとフラストレート系への応用
  - 量子アニーリングと新しいモンテカルロ法の組み合わせ
- 固体物理
  - スピン波、対角化、機械学習による励起スペクトルの計算と実験との比較
- 厳密対角化 or モンテカルロ
  - ETHが働かない many-body localization 機構の数値計算
  - 純粋状態における熱力学第二法則の数値検証
- 基礎理論の勉強 + プログラミング(基本となるコードを拡張) + シミュレーション (+ コード公開)

初回(前期は4/16(火))にテーマ決定