QCDと第一原理計算(その２)

京都大学　基礎物理学研究所　伊藤 悦子

計算物理春の学校 2024@ 沖縄県市町村自治会館 2024年3月15日

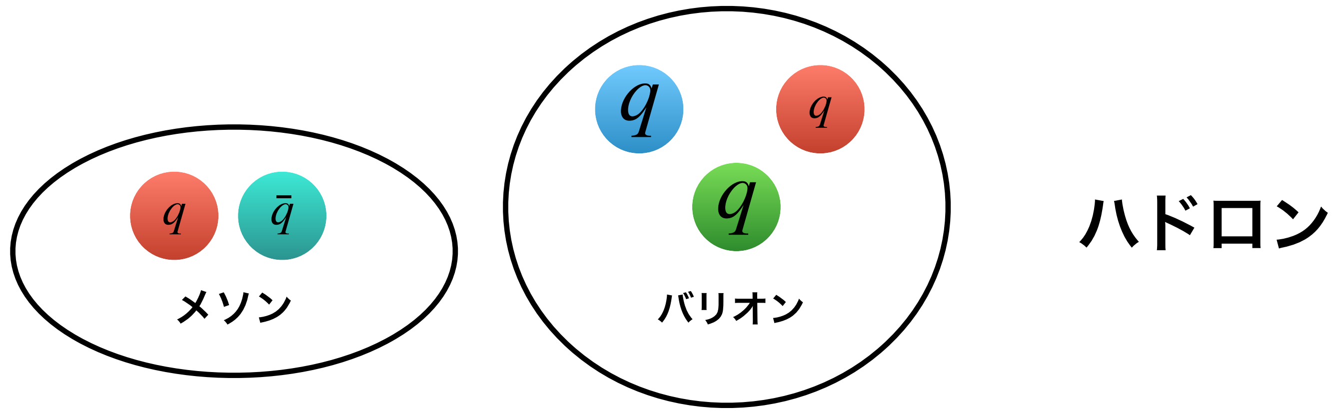
目次

1. QCD(量子色力学)とは？
2. 古典計算のアルゴリズム
   擬熱浴法, Hybrid Monte Carlo, (Rational HMC)
3. 色々な物理量の測定法
   (プラケット、閉じ込めポテンシャル、ハドロン質量、熱力学量)
4. 古典計算でわかってきたQCD/非可換ゲージ理論の性質
5. 古典計算における問題：符号問題に対する様々な取り組み
6. 量子計算について

4. 古典計算でわかってきた QCD/非可換ゲージ理論の性質

(1) QCDの閉じ込め

- クォークは単体で取り出すのが難しい！！
  「閉じ込め」



- 電磁気力や重力は、遠くへ行くと力が小さくなる

- QCD(強い力)は、近くだと力が小さい(漸近自由性)
  1973年 David Gross, H.David Politzer, Frank Wilczek

2004年　ノーベル賞

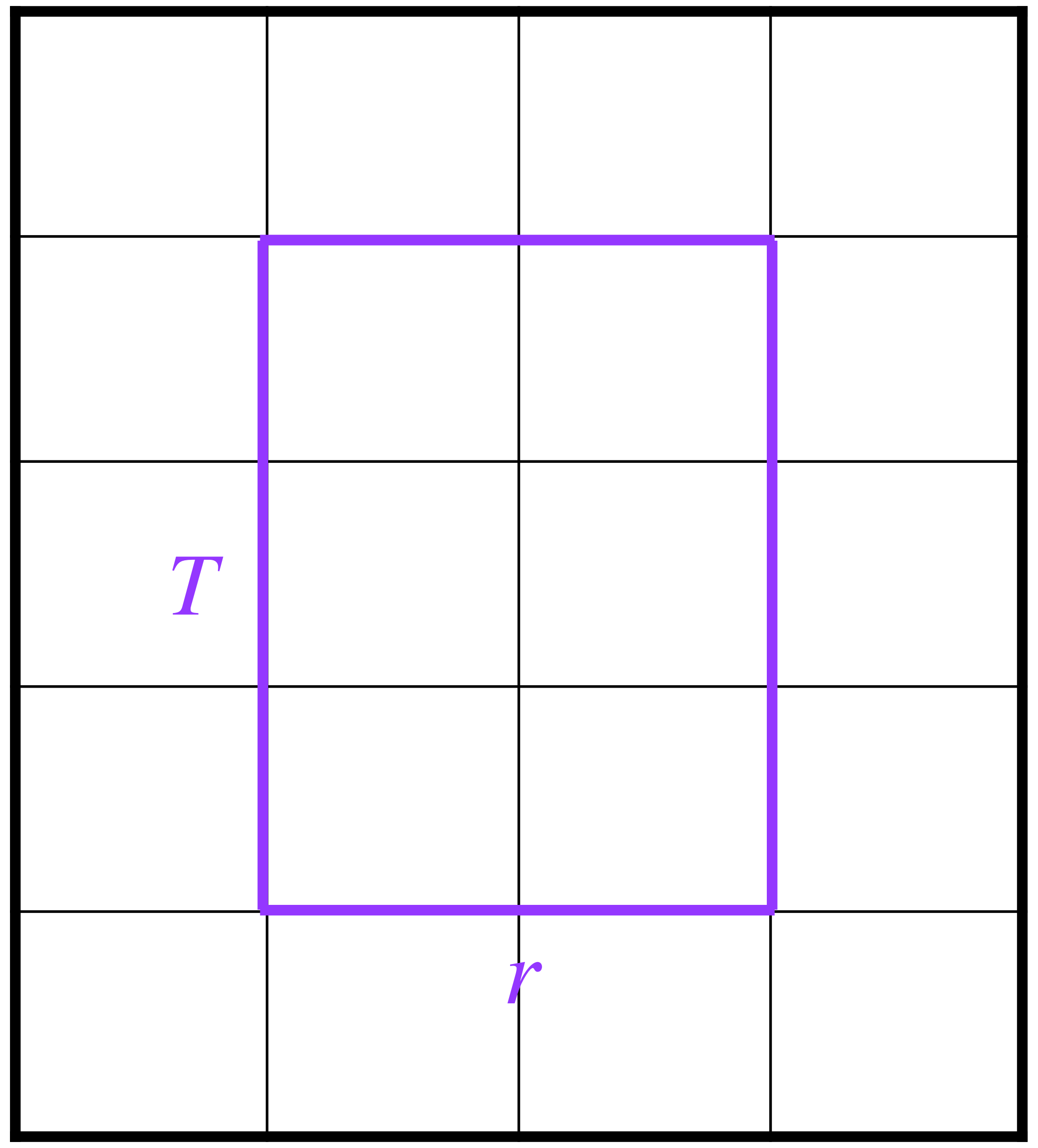
May, 2023 @ U. of Minnesota

(1) QCDの閉じ込め

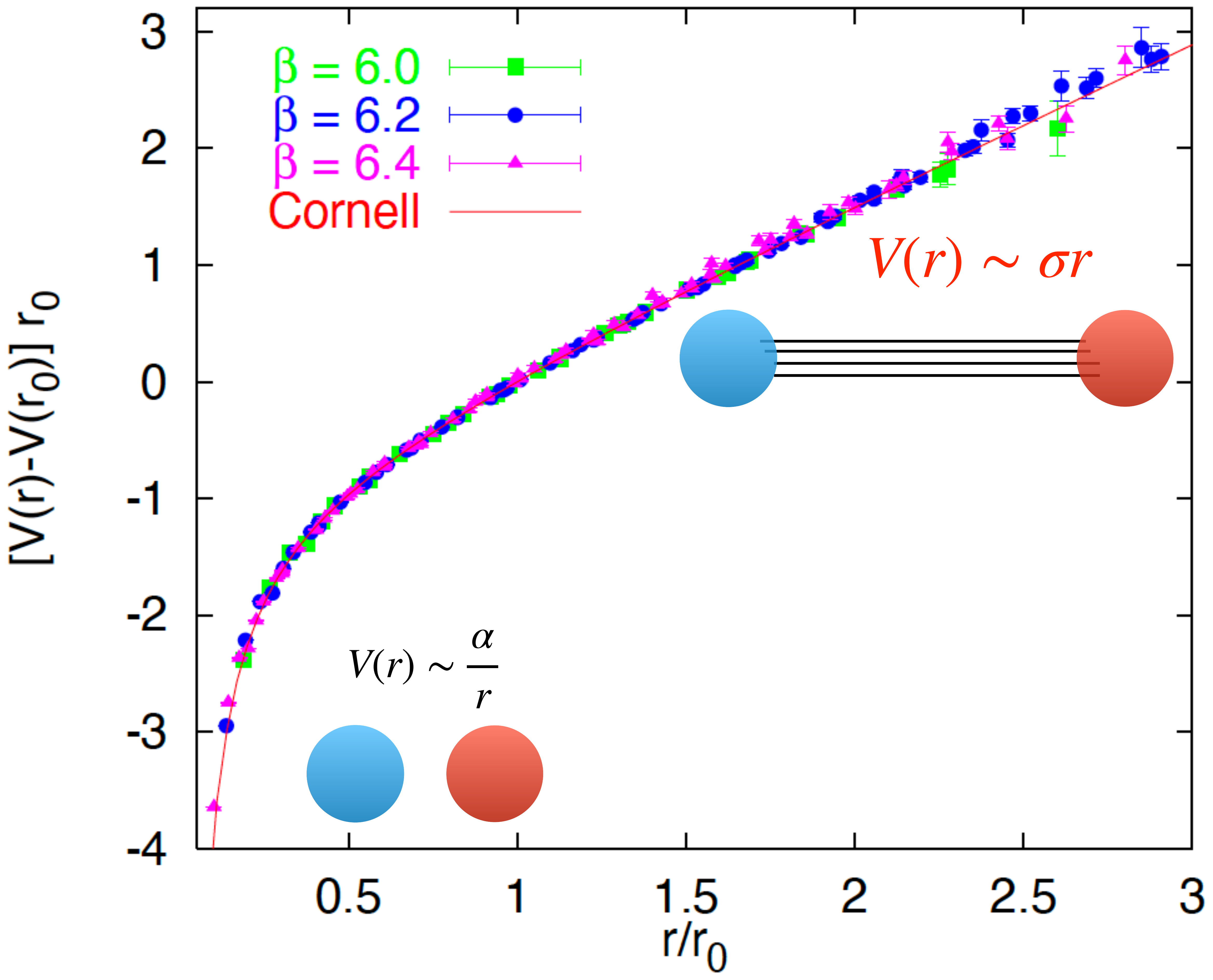
- クォークの閉じ込めと線形ポテンシャル

物理量：Wilson loop

$$\langle W(C) \rangle \underset{T \to \infty}{\approx} e^{-TV(r)} = \mathrm{tr}\left[\prod_{i \in C} U_i\right]$$



G.Bali, Phys.Rept.343:1 (2000)



(1) QCDの閉じ込め

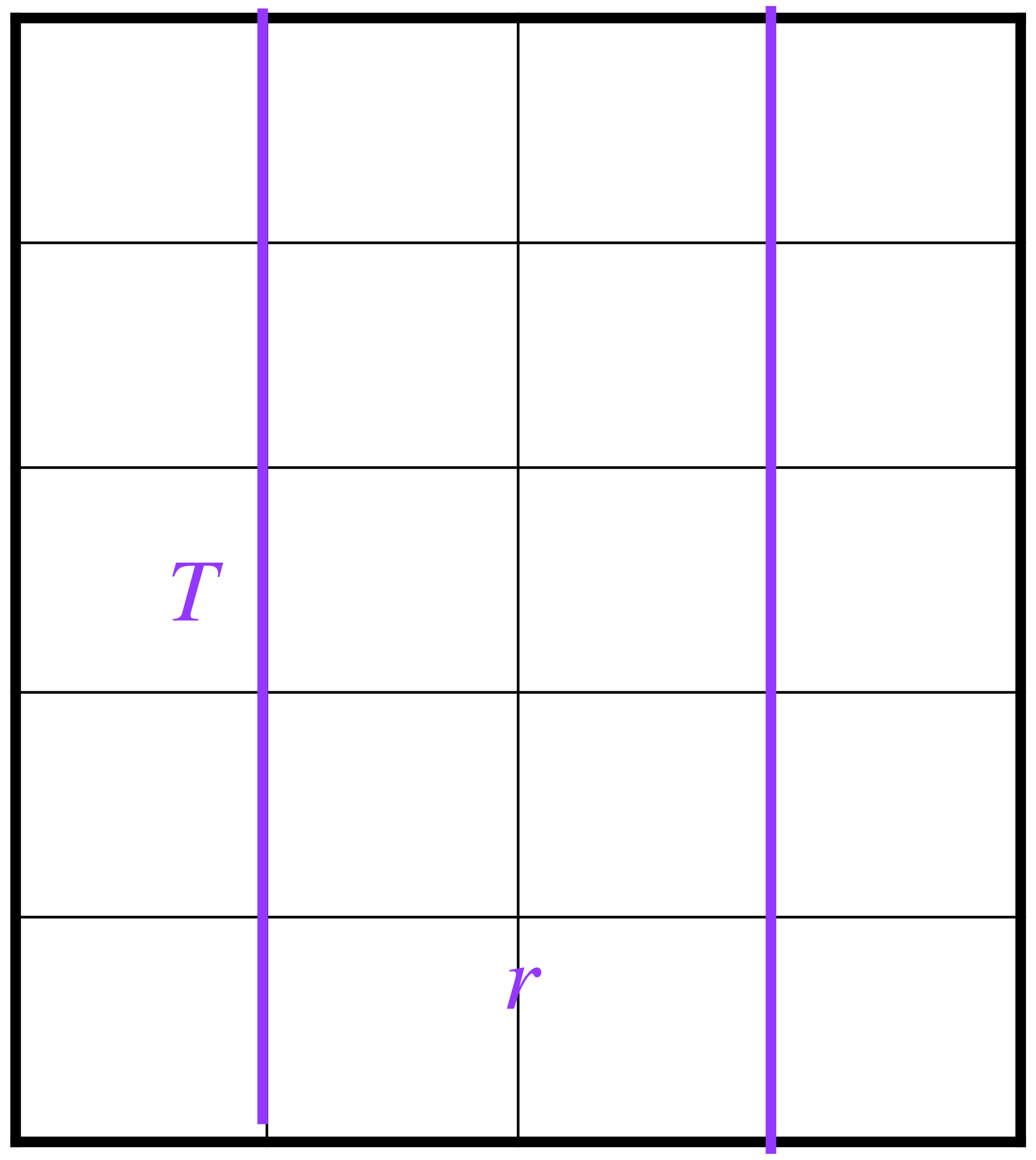
- 閉じ込めと中心対称性　Z3 transformation　$U_\mu(x) \to e^{2\pi k i/3} U_\mu(x)$　$k = 0, 1, 2$

$\langle P(r)P(0)^\dagger\rangle \to |\langle P\rangle|^2 \ \exp[-F_{qq}(r=\infty)]$　free energy

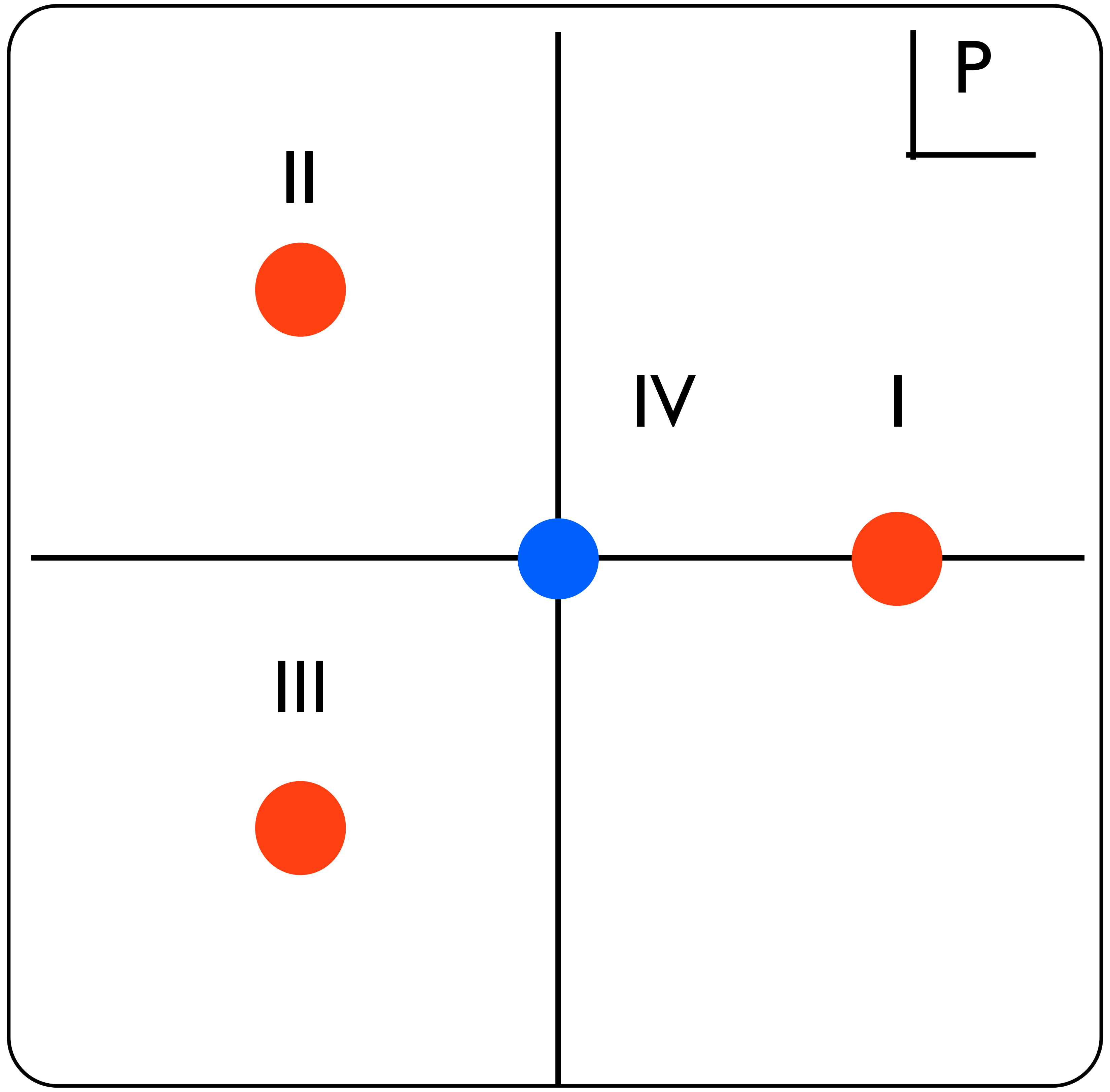
$\langle |P| \rangle = 0 \to F_{q\bar{q}}(r \to \infty) = \infty$　confinement

$\langle |P| \rangle \neq 0 \to F_{q\bar{q}}(r \to \infty) \neq \infty$　deconfinement

$\langle P \rangle$が閉じ込めの秩序変数 (quenched QCDでは厳密)



Polyakov loopの複素平面での分布

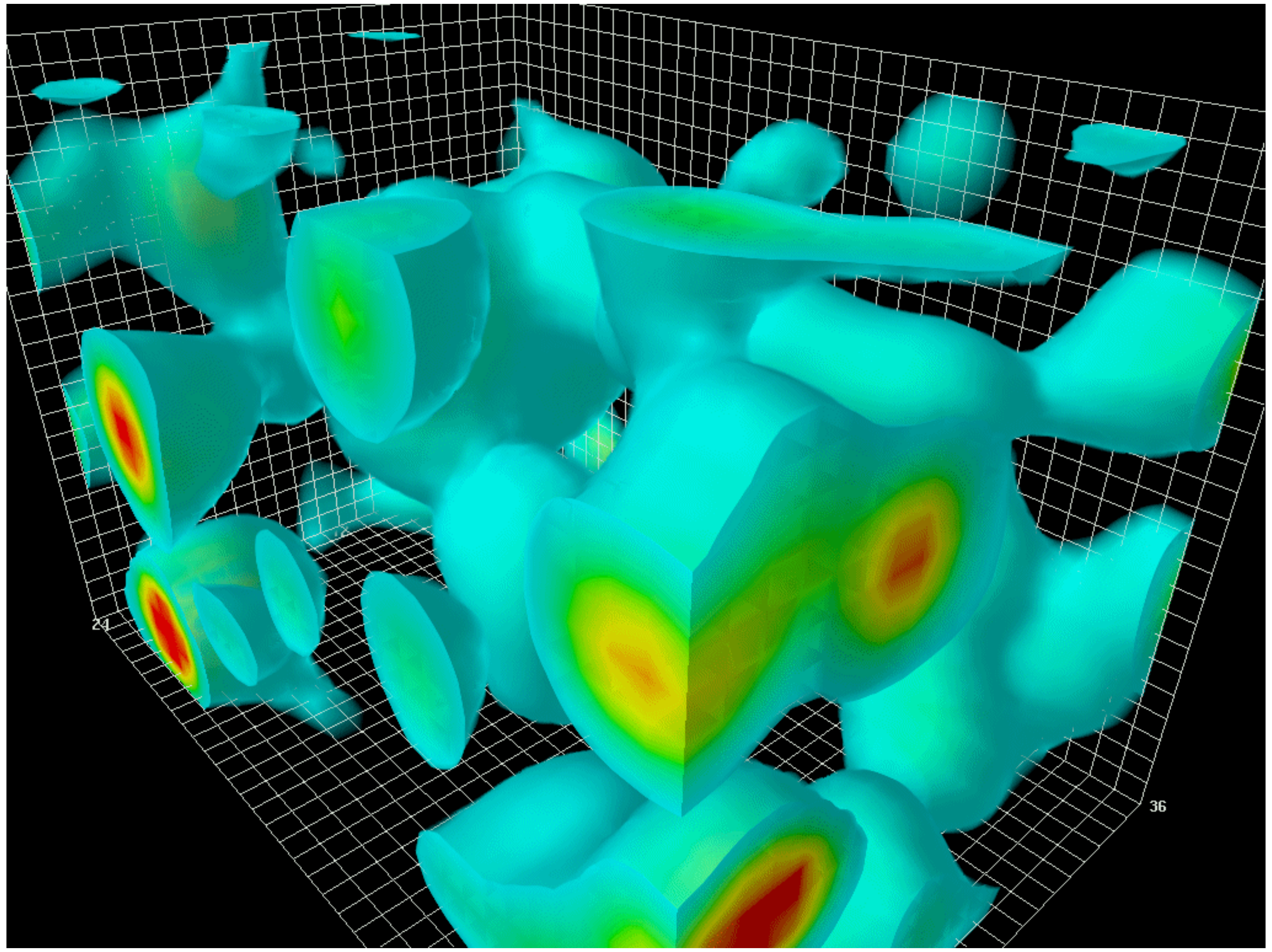


I,II,III : deconfined phase

IV　: confined phase

(2) 真空のゆらぎ・インスタントンの可視化

- 真空のゆらぎとインスタントン



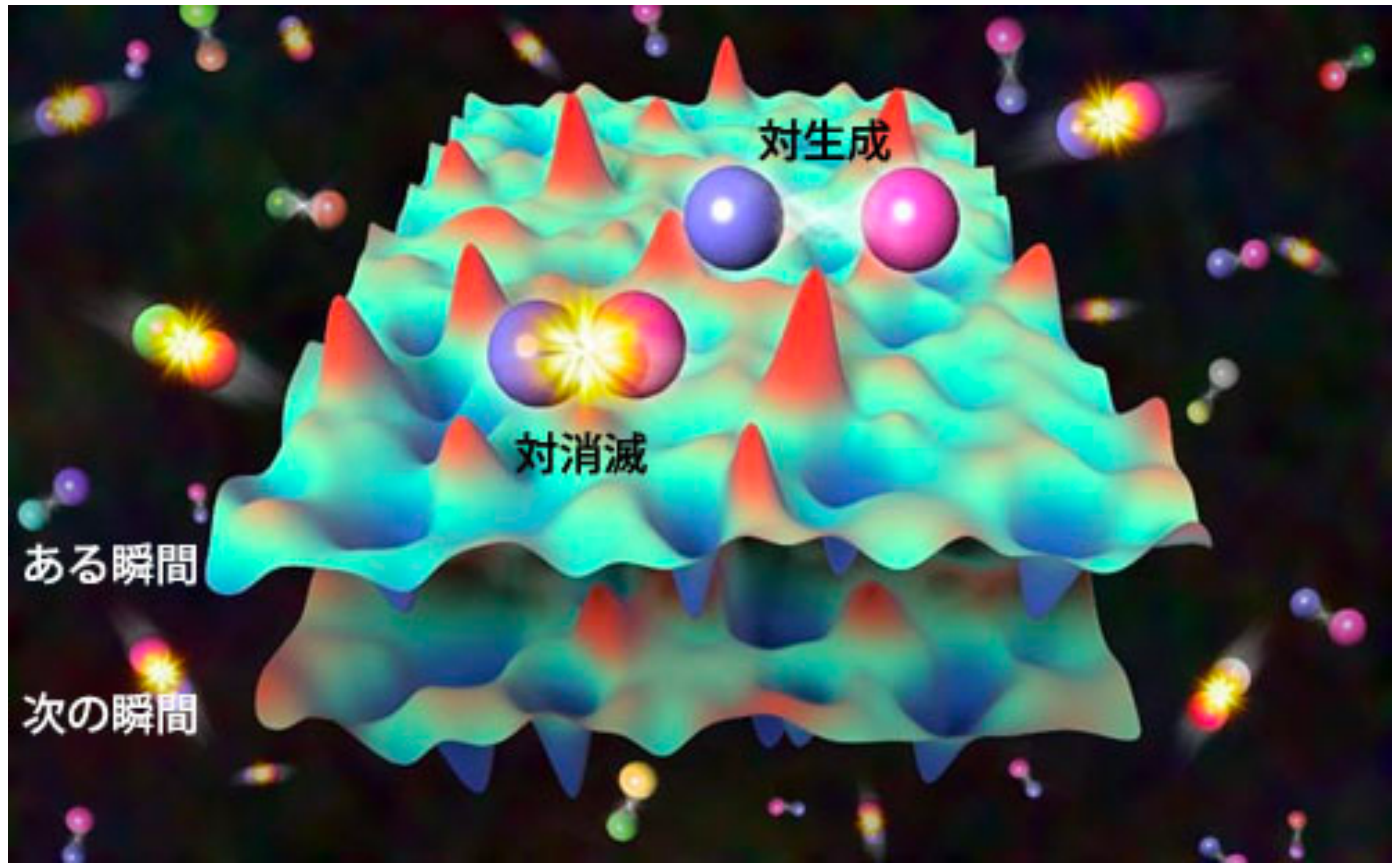
©Derek B. Leinweber

- 場の量子論

= 相対性理論 + 量子力学

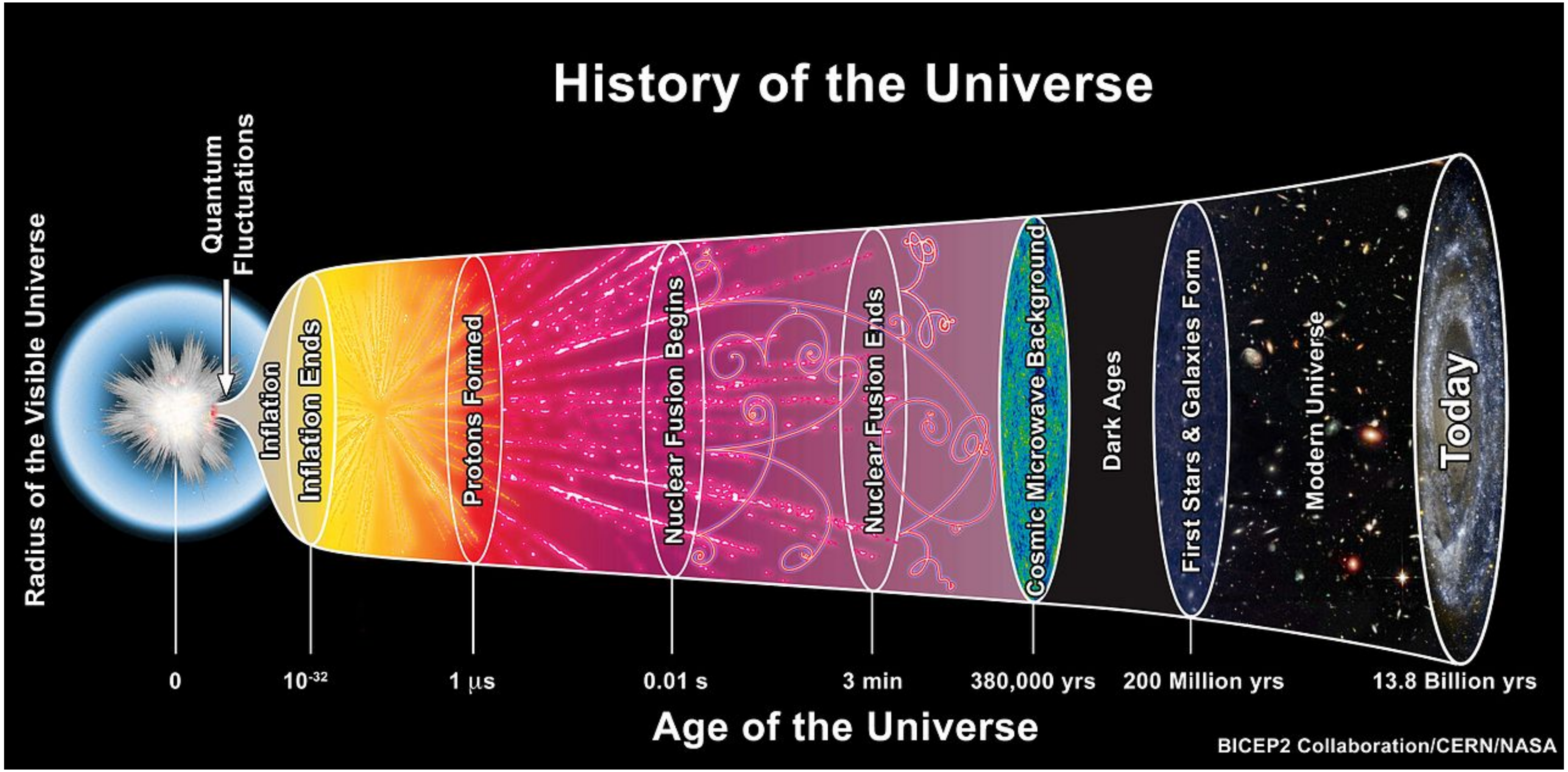
$$\Delta E = \Delta mc^2 \qquad \Delta E \Delta t \geq \frac{h}{4\pi}$$

短い時間なら大きなエネルギーの揺らぎが生じ, そこから粒子・反粒子が対生成される



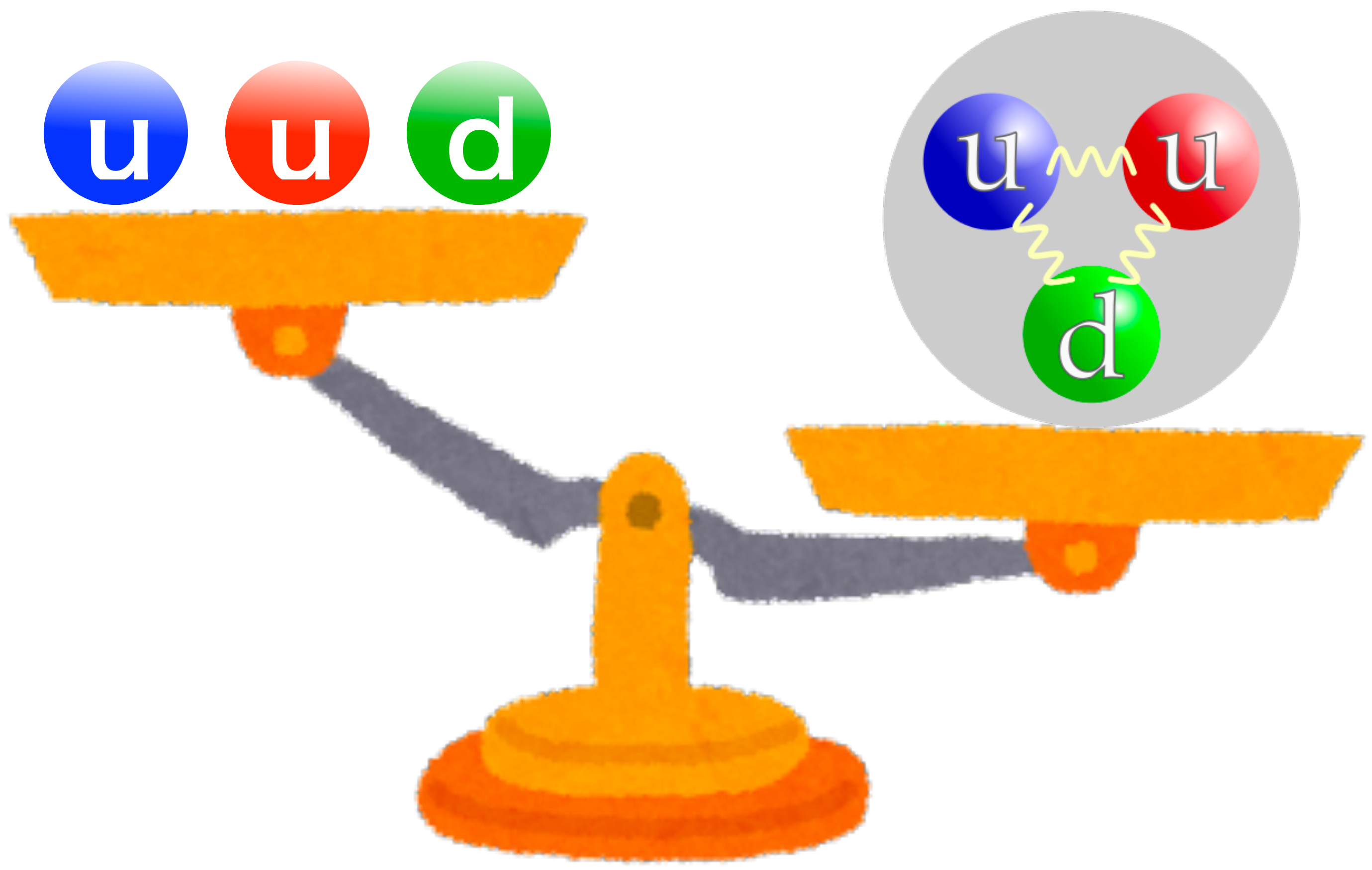
(2) 真空のゆらぎ・インスタントンの可視化

- 宇宙は量子的な”ゆらぎ”から始まった！



(3) ハドロン質量の理論的予言と実験との一致

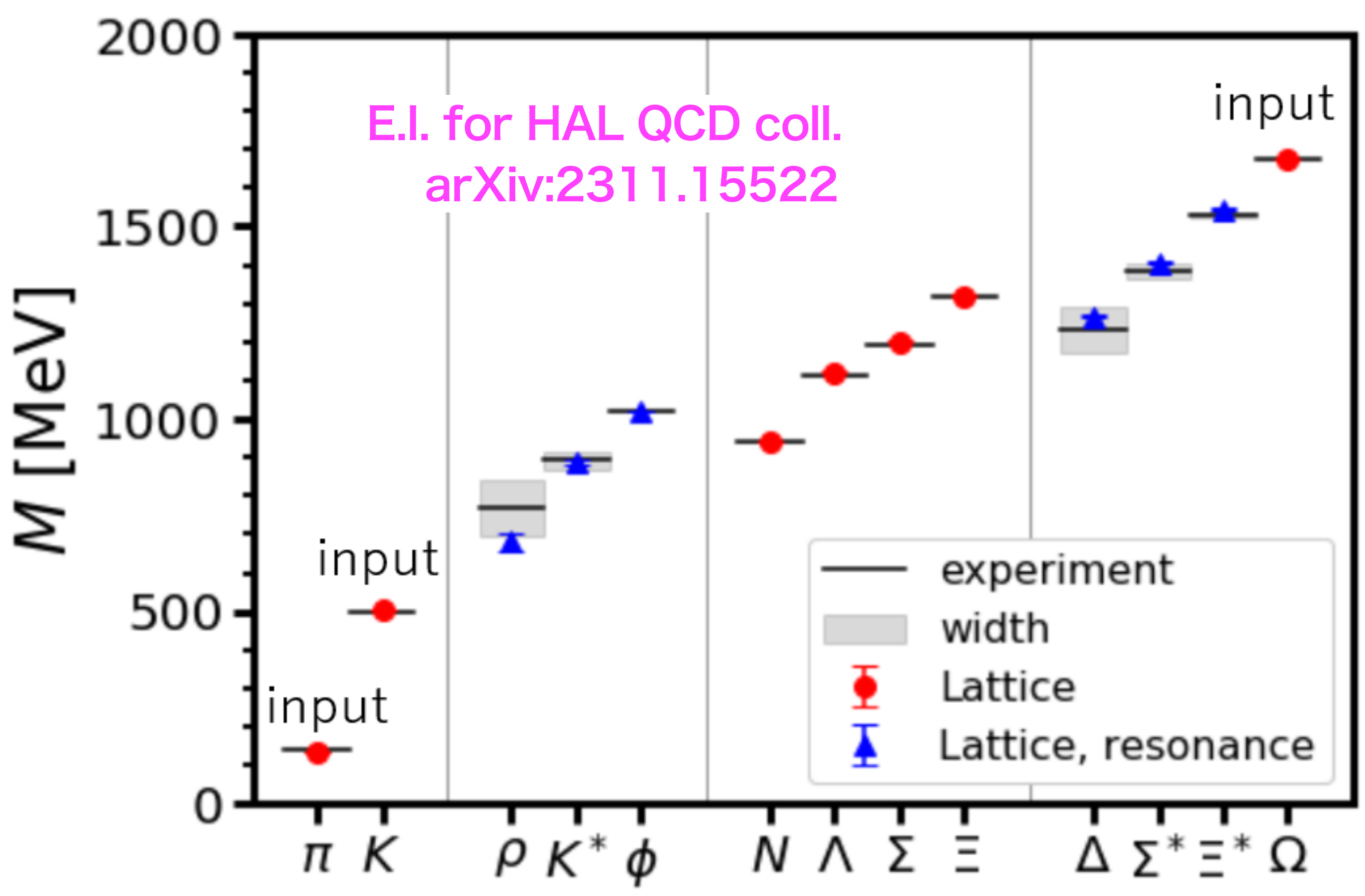
- クォークの質量とハドロンの質量
(カイラル対称性の自発的破れ)



u,d quark mass ~ 2-5MeV
proton mass ~ 938MeV

$$\mathscr{L} = -\frac{1}{4}F^a_{\mu\nu}F^a_{\mu\nu} + \bar{\psi}(i\gamma_\mu D_\mu + m)\psi$$

私の最近の研究から



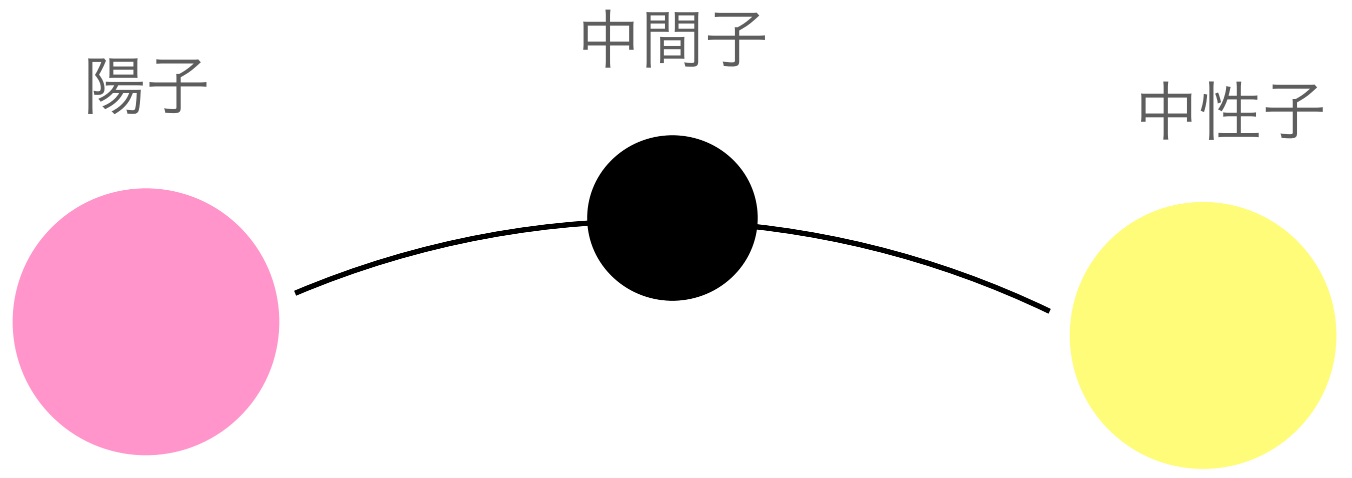
QCD作用には３つのインプットしかないが, その３つでたくさん種類のハドロンの質量が実験結果と合う

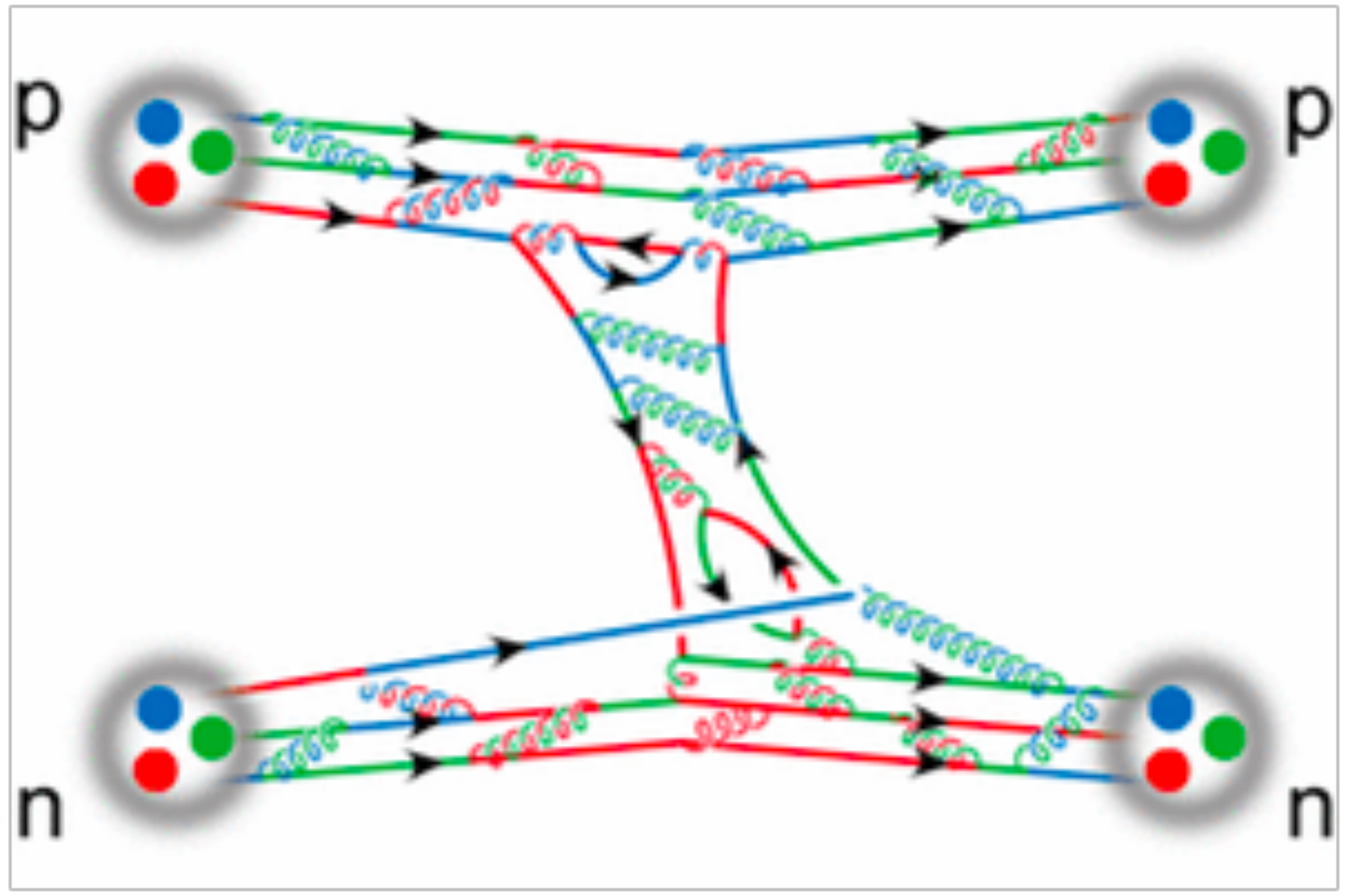
(4) 核力のQCDからの導出と散乱

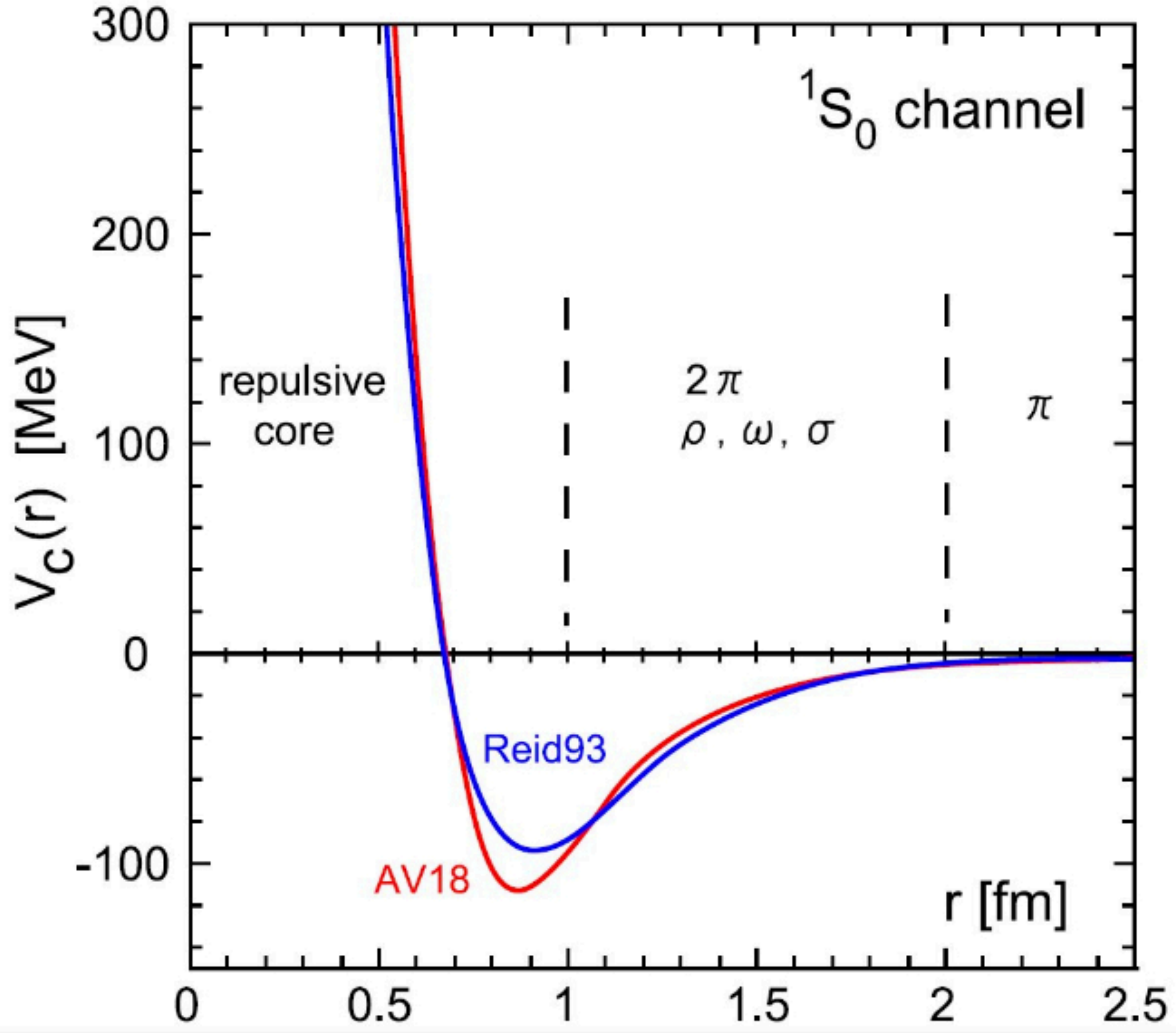
- 核力ポテンシャル

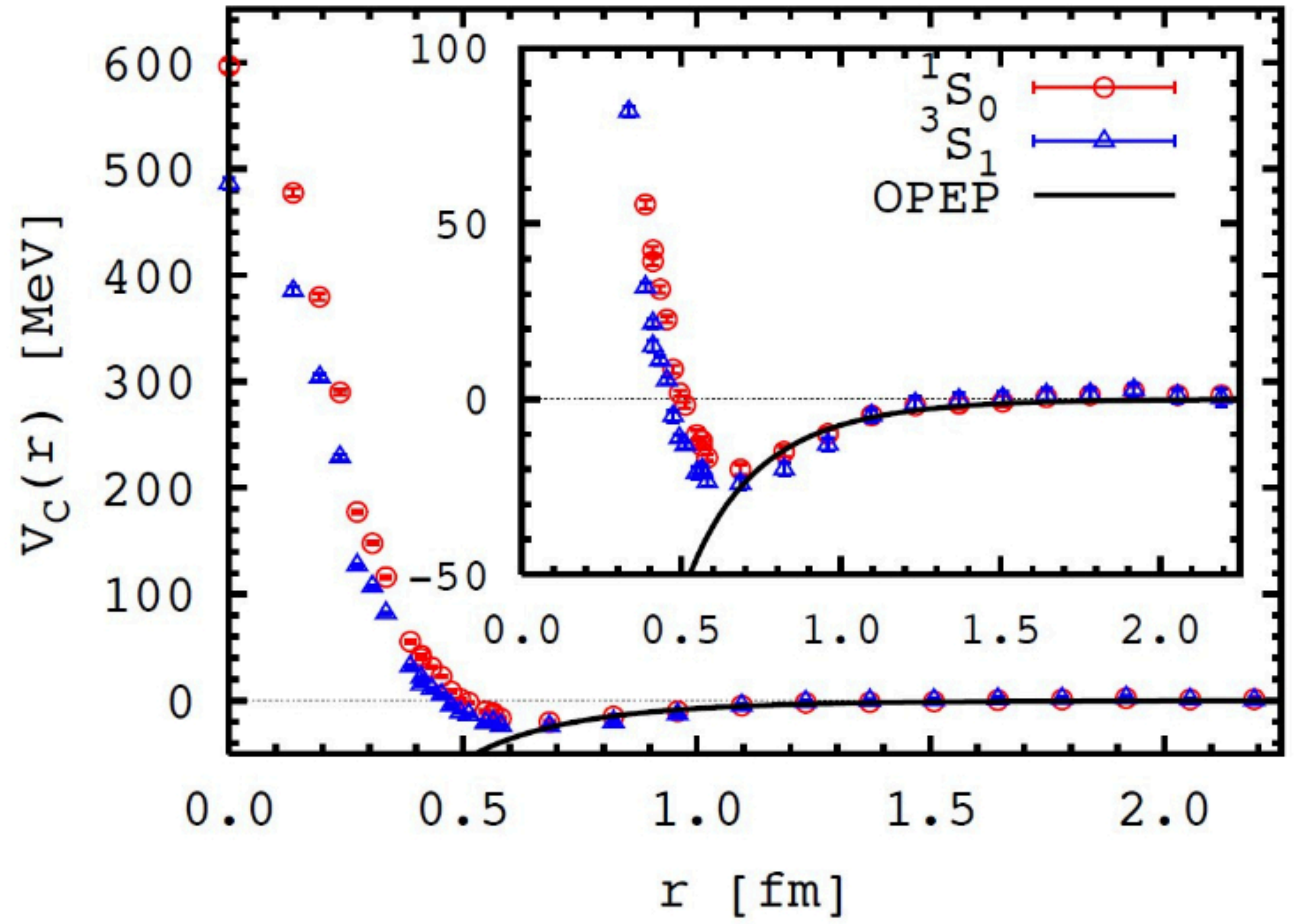
核子同士が近いとパウリの排他率で斥力

その後,近距離離(原子核の大きさ ~1fm)にだけ働く引力





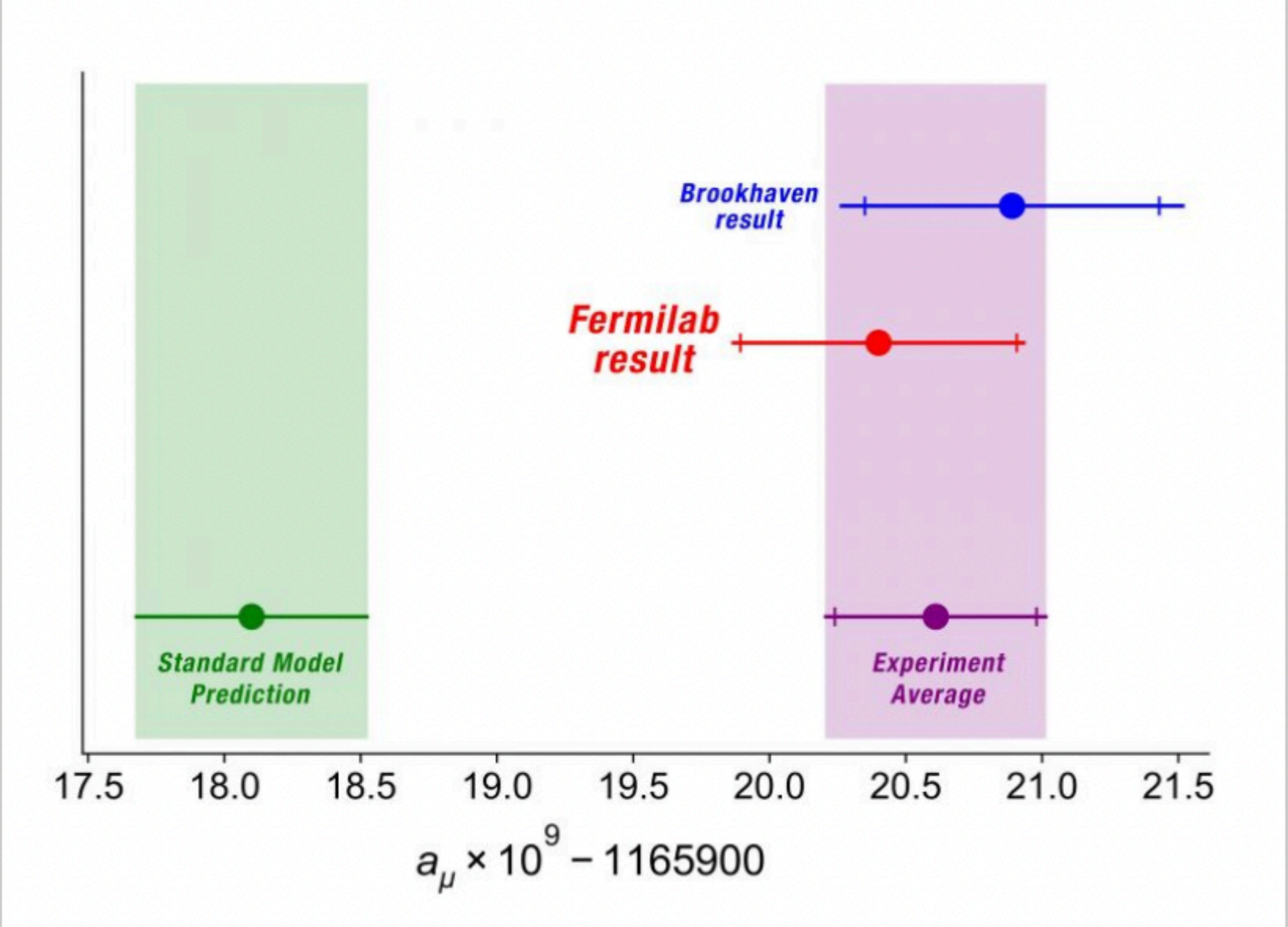




(左)現象論的核力ポテンシャルの例, (右)格子QCDを用いて計算した核力ポテンシャル

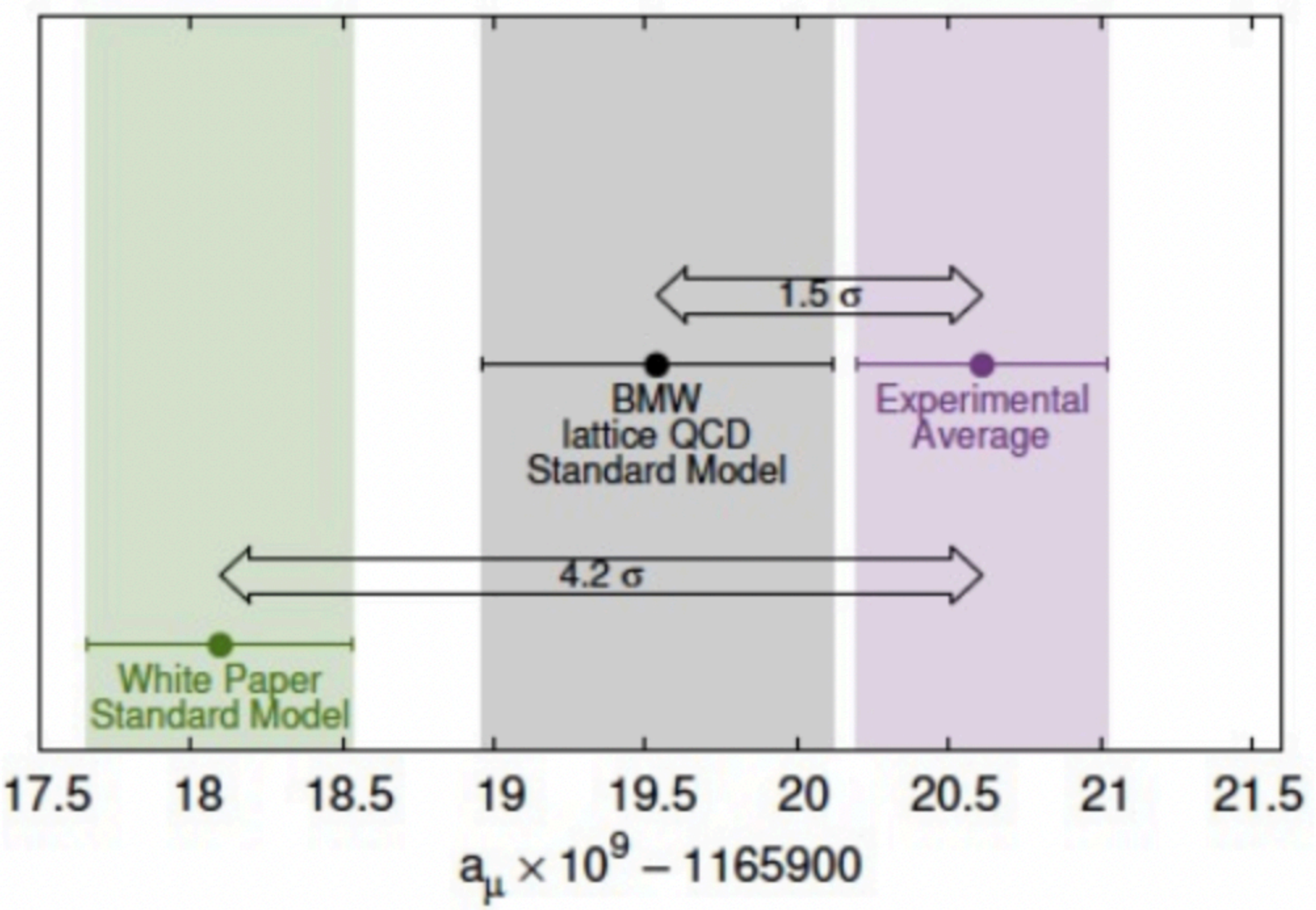
Aoki, Ishii, Hatsuda, HAL QCD coll.(2007 -)

(5) 素粒子標準模型からのズレの探索：muon g-2など



©FermiLab

(5) 素粒子標準模型からのズレの探索：muon g-2など



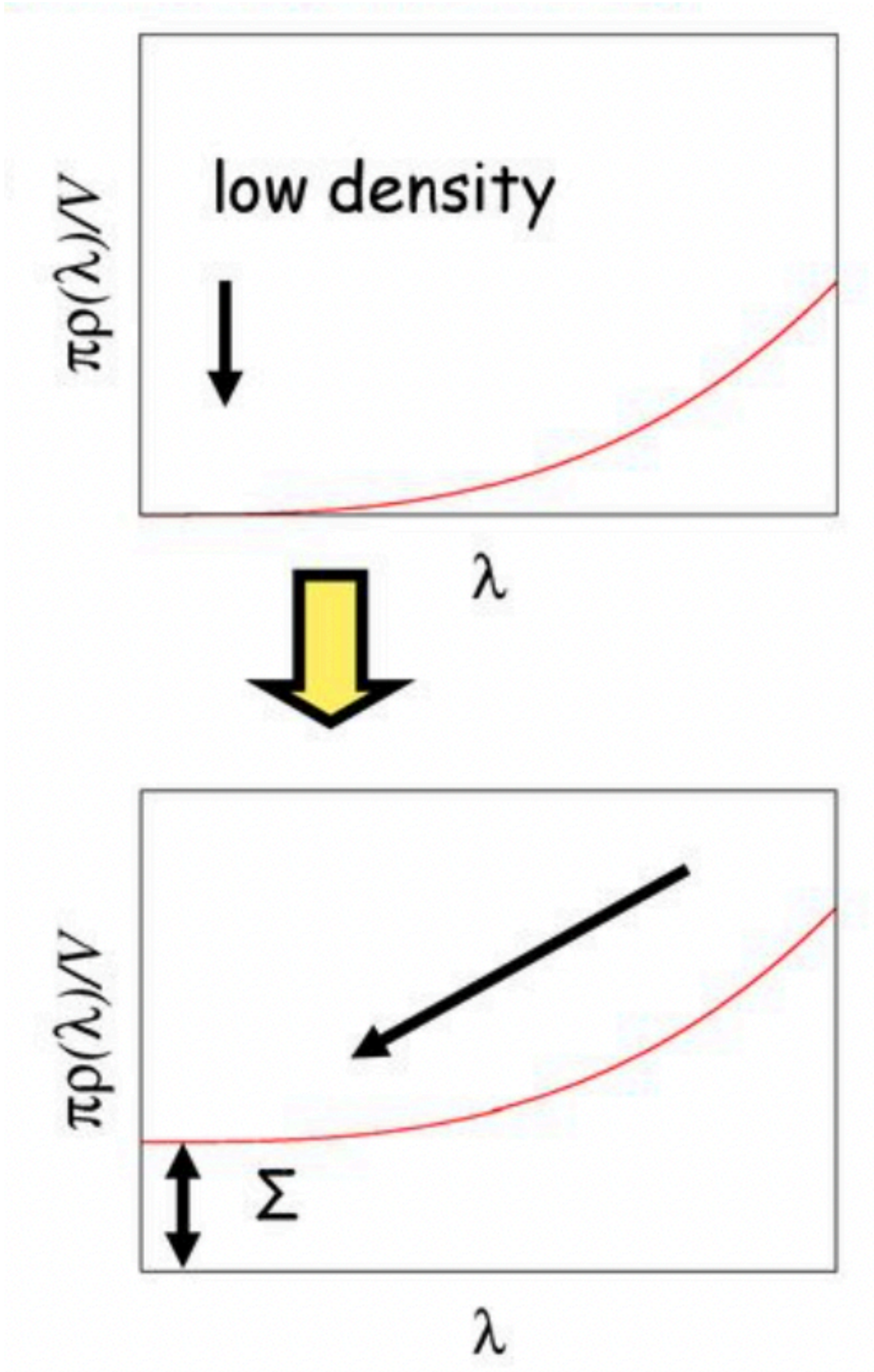
©CERN SPS

(6) カイラル対称性の自発的破れ

カイラル対称性の自発的破れ:

masslessの極限でもchiral condensateは値を持つ

Banks and Casher(1980)



自由場の場合

$\rho(\lambda) \sim \lambda^3$

カイラル対称性が破れる場合

$\rho(\lambda) \sim \lambda^\alpha + \Sigma$

Banks-Casher関係式： $\lim_{\lambda\to 0}\lim_{m\to 0}\lim_{V\to\infty}\rho(\lambda,m) = \frac{\Sigma}{m}$

$\rho(\lambda,m)$はDirac演算子のspectral density

$$\rho(\lambda,m) = \frac{1}{V}\sum_{k=1}^{\infty}\langle\delta(\lambda-\lambda_k)\rangle$$

Σとchiral cond.の関係 $\Sigma = -\lim_{m\to 0}\lim_{V\to\infty}\langle\bar{\psi}\psi\rangle$

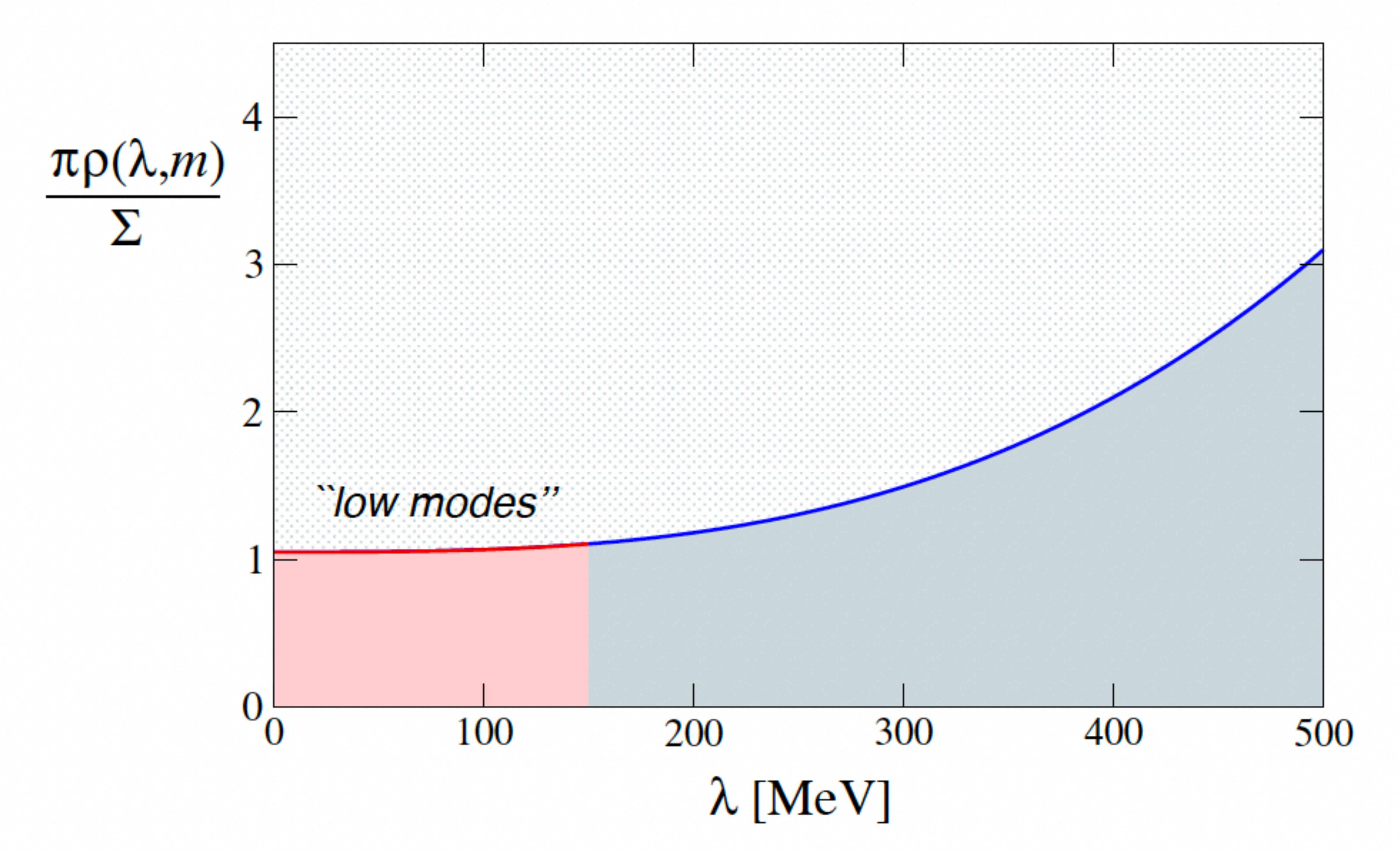
Slide by H.Fukaya

(6) カイラル対称性の自発的破れ

カイラル対称性の自発的破れ:

masslessでもchiral condensateは値を持つ

Banks and Casher(1980)



Slide by M. Luescher (2008)

Banks-Casher関係式： $\lim_{\lambda\to 0}\lim_{m\to 0}\lim_{V\to\infty}\rho(\lambda,m)=\frac{\Sigma}{m}$

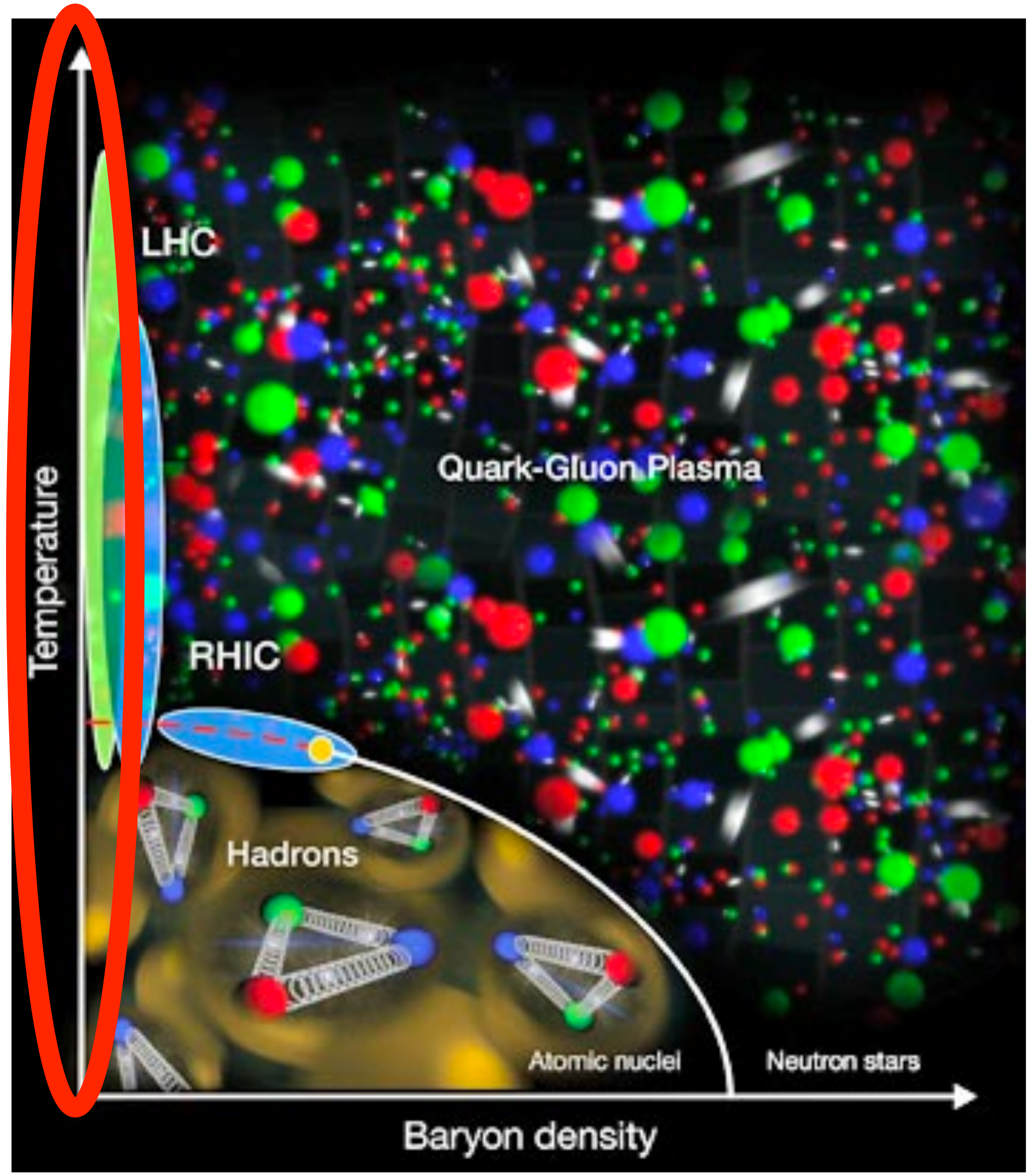
$\rho(\lambda,m)$はDirac演算子のspectral density

$$\rho(\lambda,m)=\frac{1}{V}\sum_{k=1}^{\infty}\langle\delta(\lambda-\lambda_k)\rangle$$

Σとchiral cond.の関係 $\Sigma=-\lim_{m\to 0}\lim_{V\to\infty}\langle\bar{\psi}\psi\rangle$

(7) 有限温度相転移

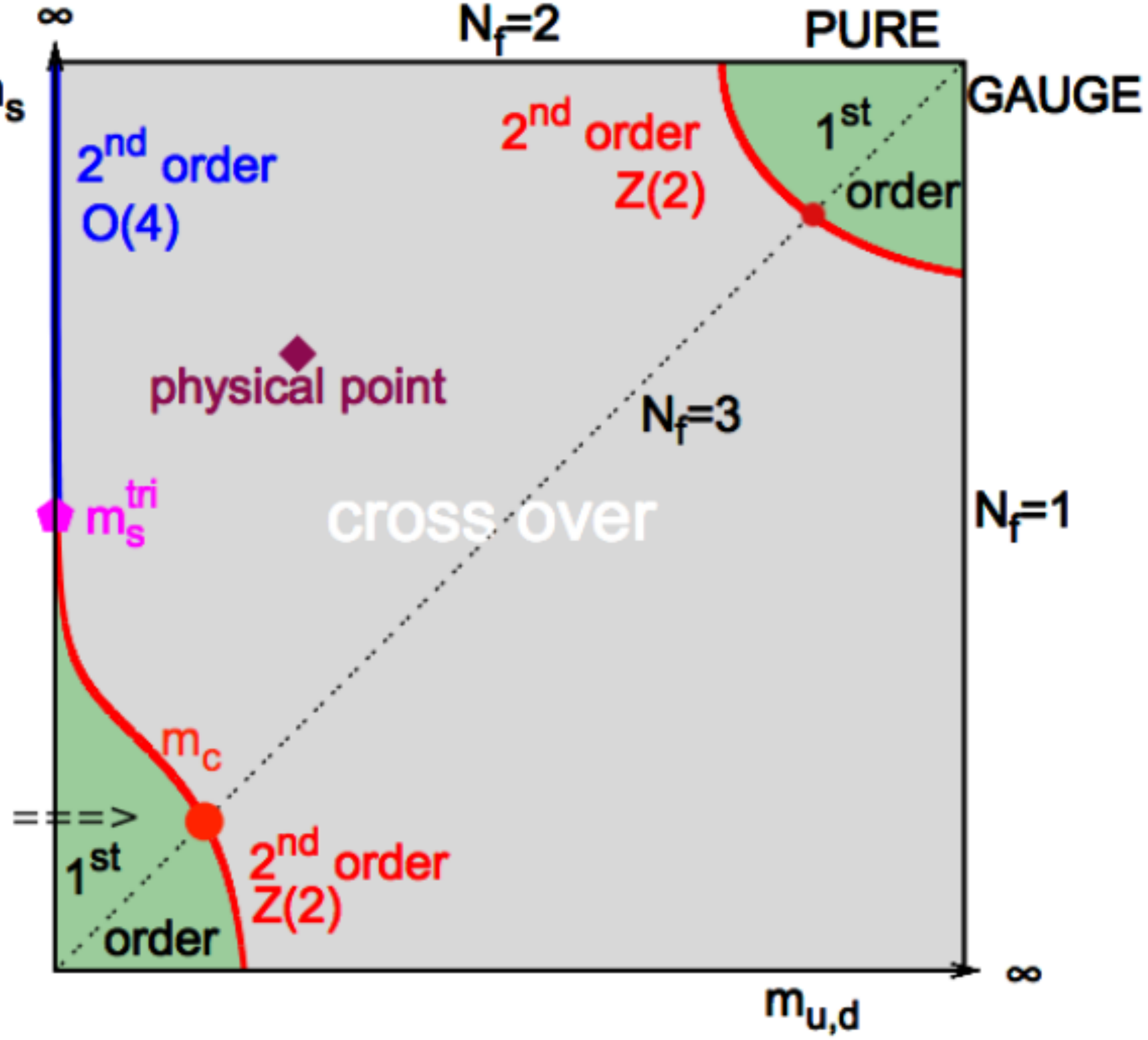
熱力学的相転移



	QGP相 (高温)	ハドロン相 (低温)
閉じ込め **(Polyakov loop)**	なし $\langle \lvert L \rvert \rangle > 0$	あり $\langle \lvert L \rvert \rangle \approx 0$
カイラル対称性 **(chiral cond.)**	回復 $\langle \bar{\psi}\psi \rangle = 0$	破れ $\langle \bar{\psi}\psi \rangle \neq 0$

(7) 有限温度相転移(?)

熱力学的相転移: 相転移かcrossoverか？



相転移の次数はクォークの数と質量に依存する

質量無限大の極限：quecnhed QCD

中心対称性(閉じ込めの秩序変数)が厳密でSU(3)ゲージ理論は1次相転移

質量ゼロの極限：Nf=3, massless QCD

カイラル対称性が厳密で有効模型の議論から

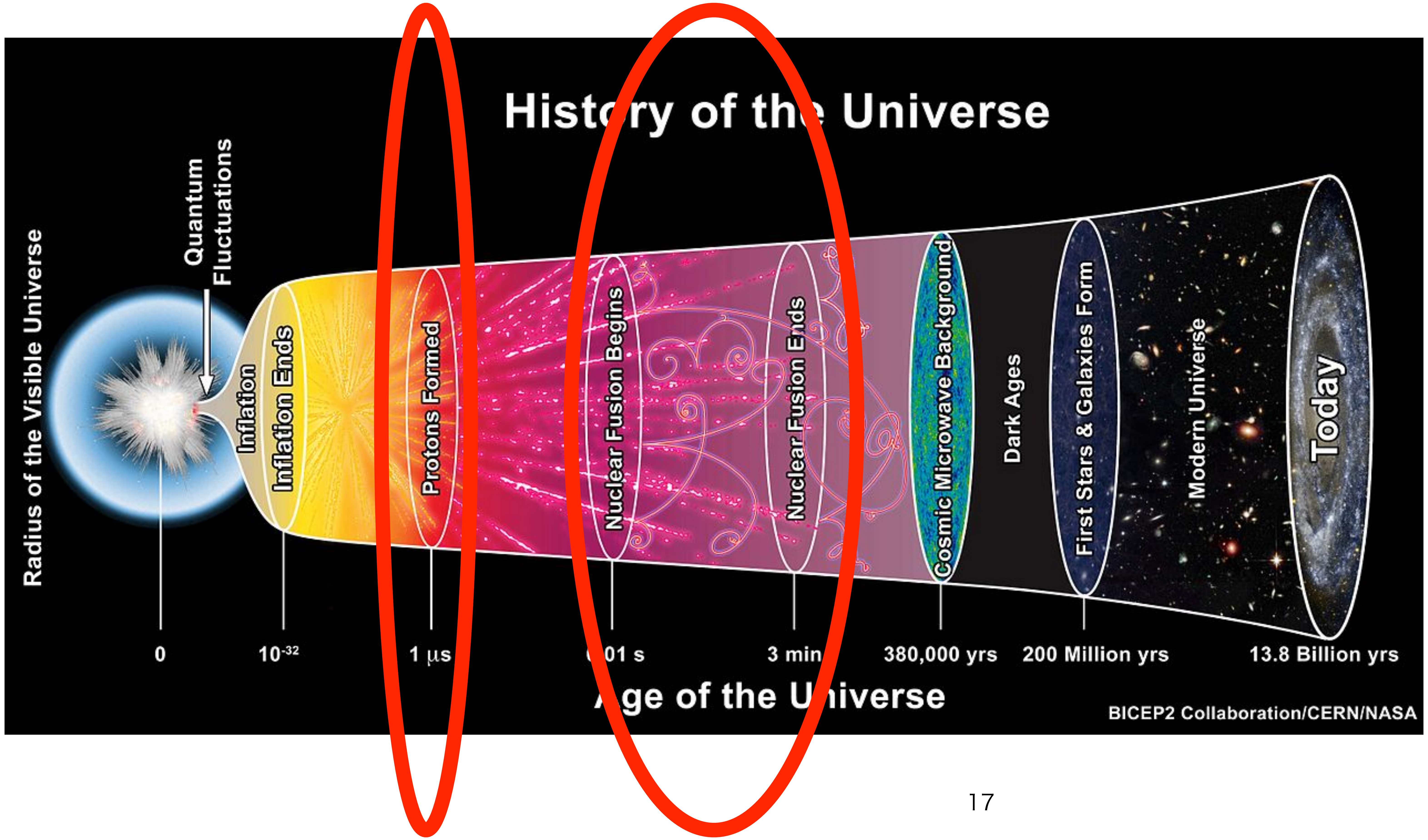
Nf=3の時は１次相転移

物理点では？　=> Crossover (by Lattice QCD)

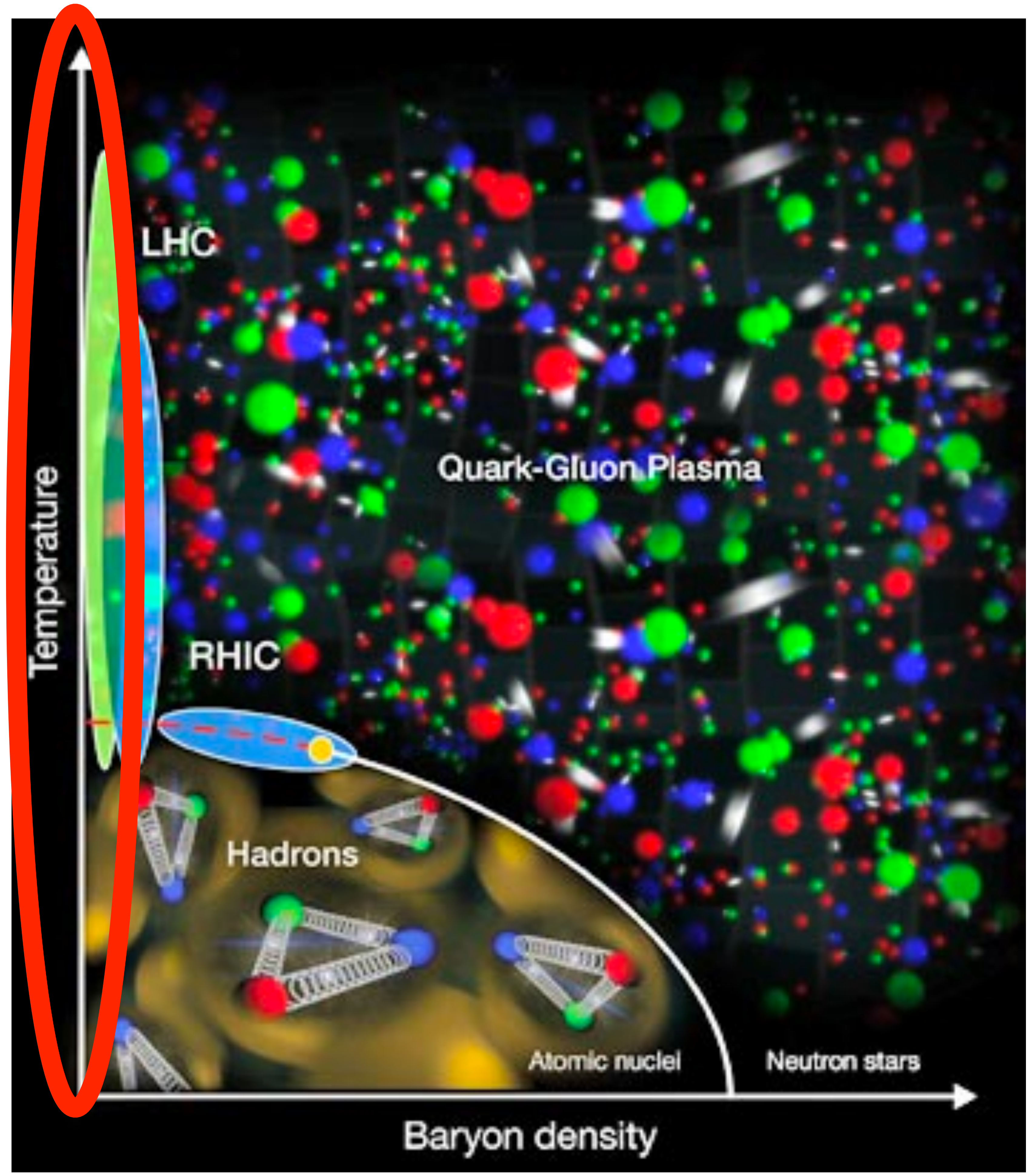
$m_s \to \infty$ かつ $m_{u,d} = 0$ のNf=2 QCDは？

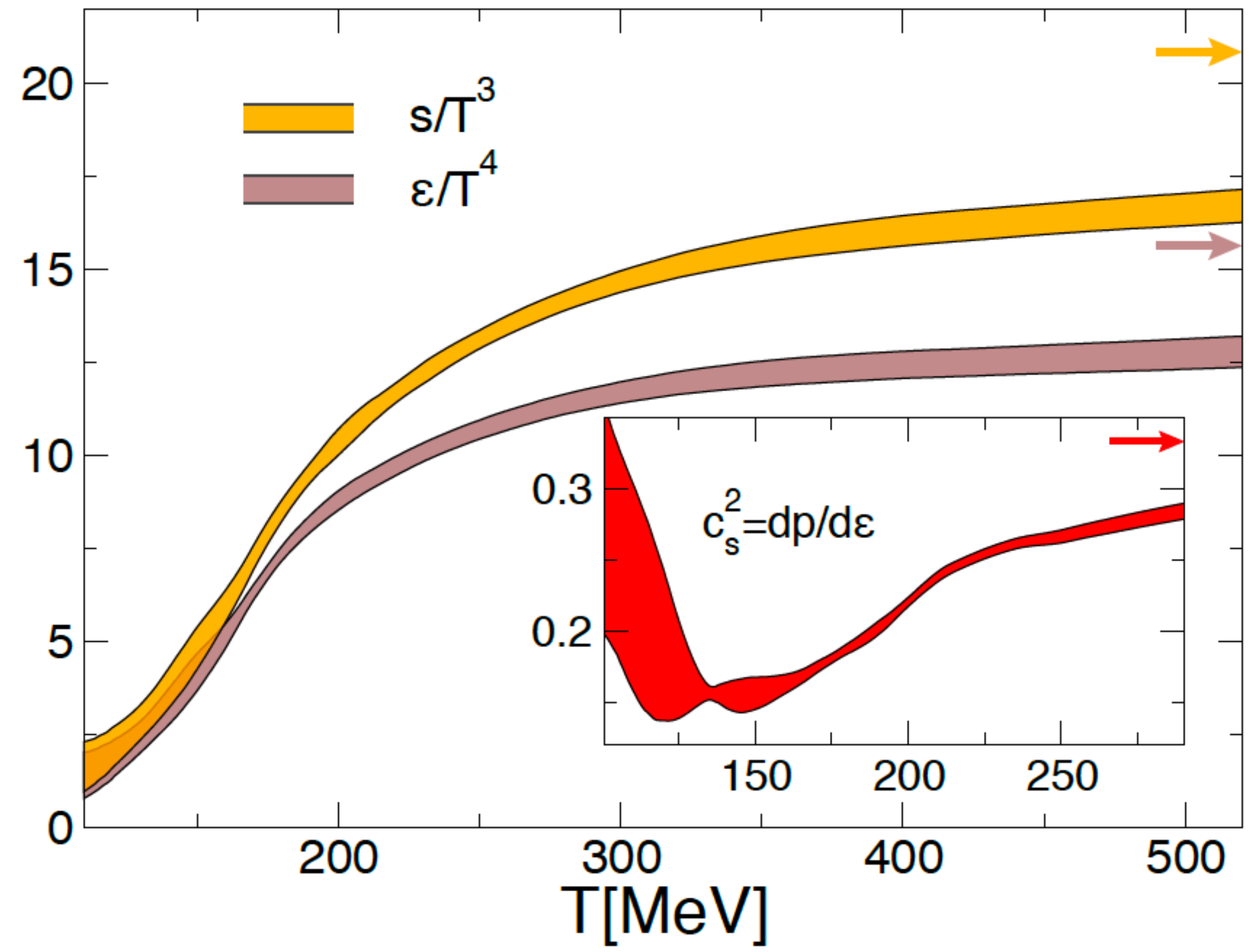
(7) 有限温度相転移

- 宇宙が冷えて「クォークグルオンプラズマ状態」から「ハドロン」が形成
  この相転移でどのくらいのエネルギー放出がされた？
  (実は格子QCDによる"相転移"はなかったと判明！！)

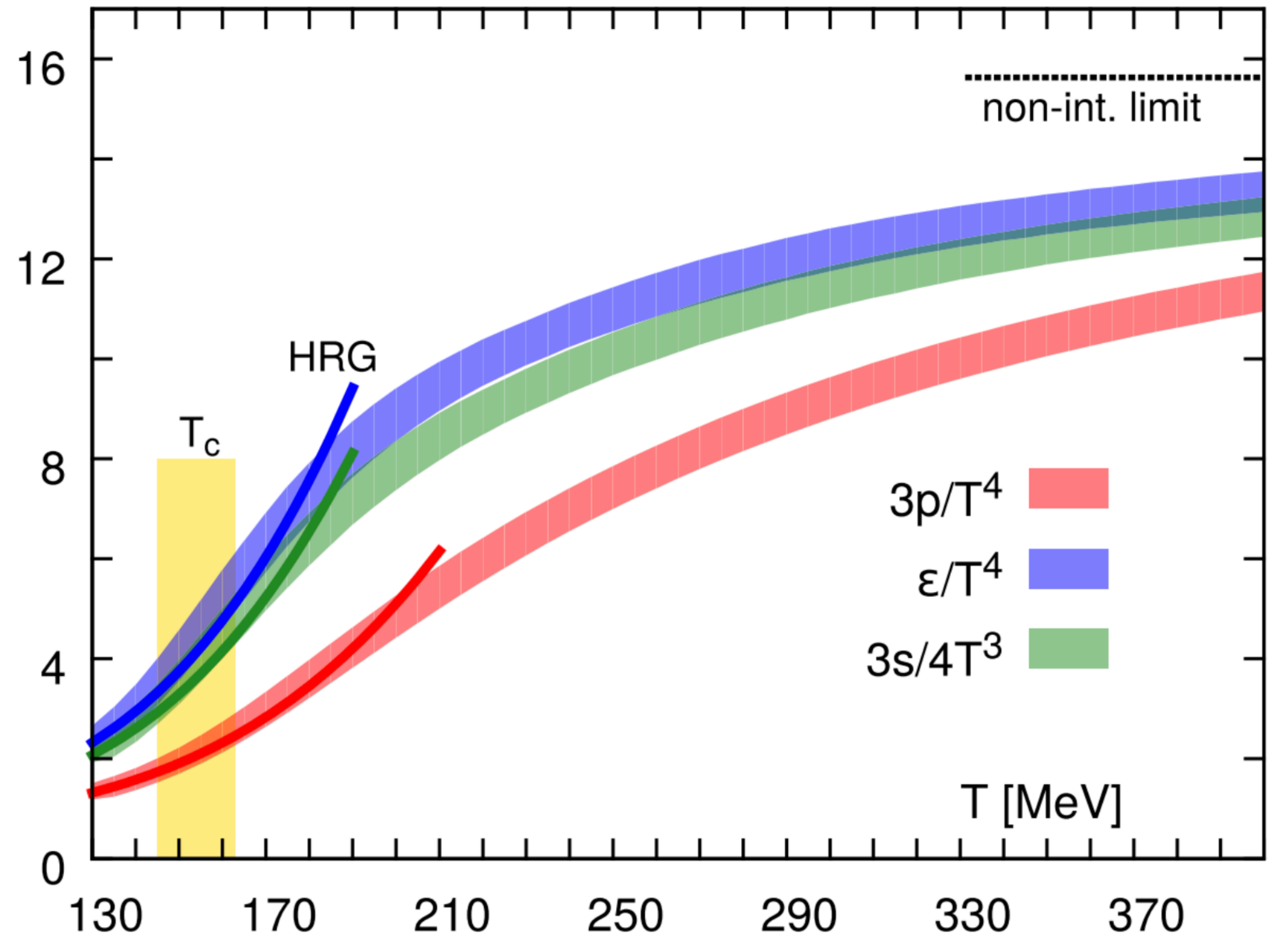


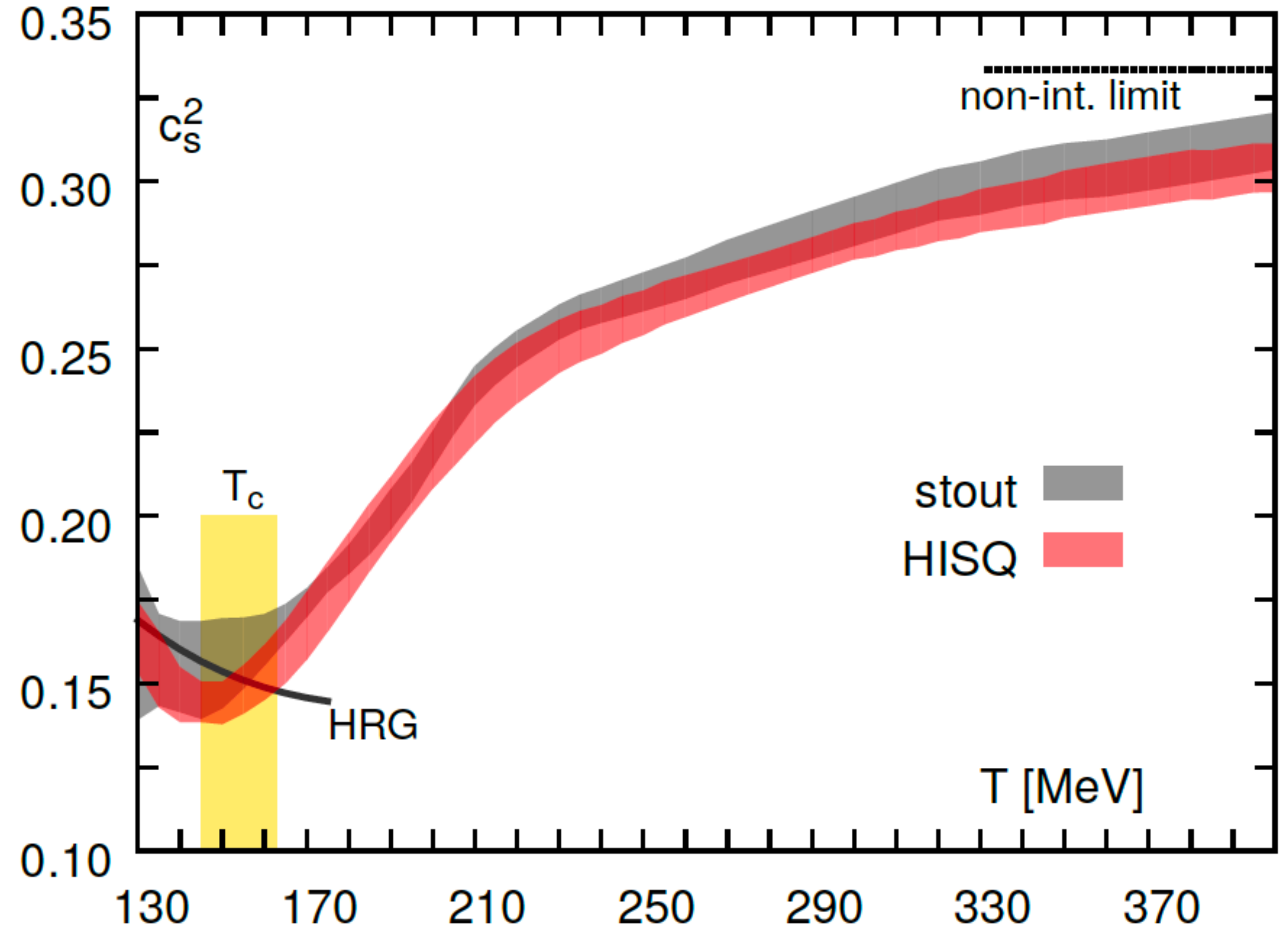
(8) 熱力学量の決定





Borsanyi et al. (2013)

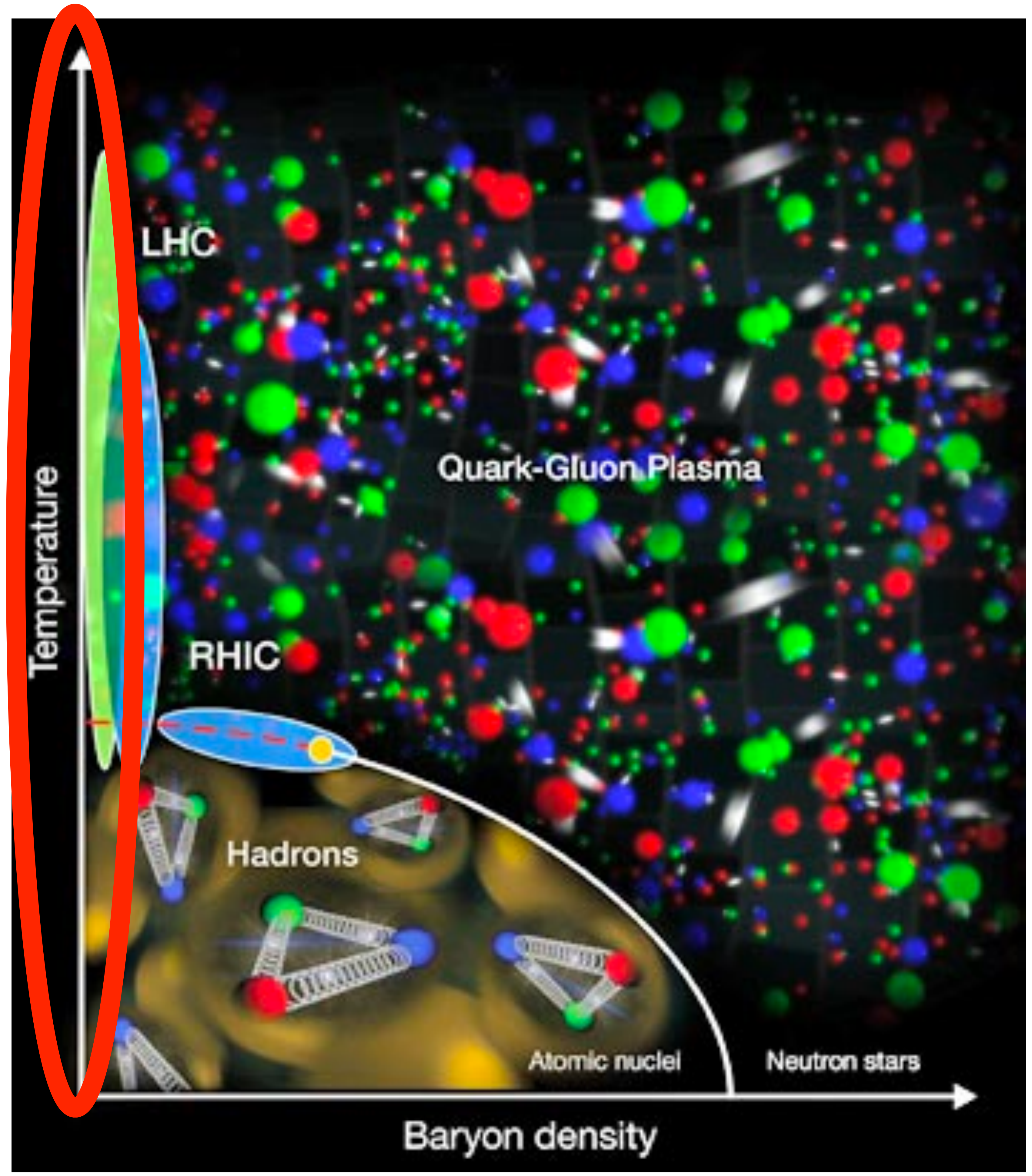




HotQCD (2014)

宇宙の始まりの頃, 温度が高くクォークやグルオンは
プラズマ状態だったと考えられる

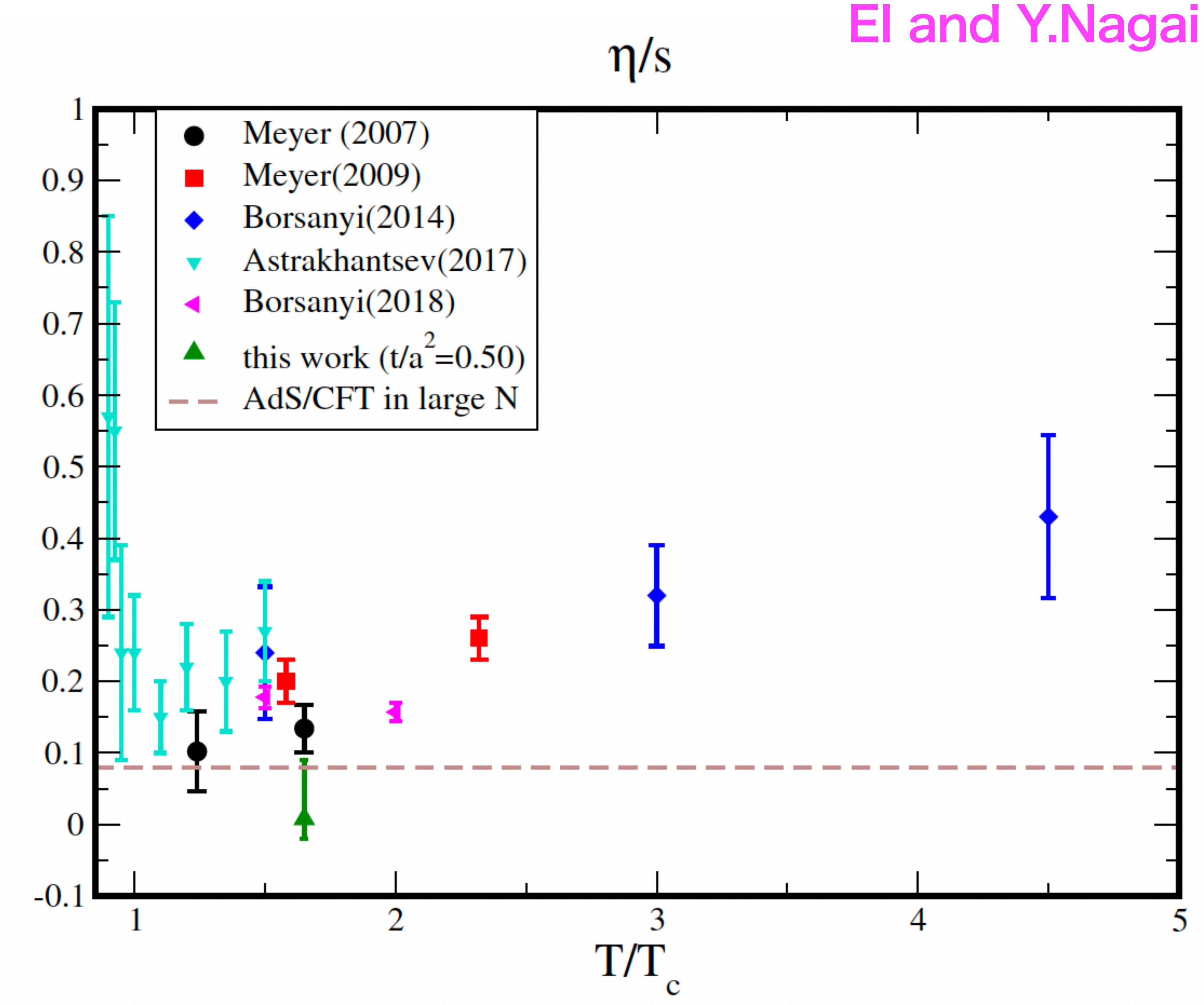
(8) 輸送係数の決定



宇宙の始まりの頃, 温度が高くクォークやグルオンは
プラズマ状態だったと考えられる

- RHIC実験によってTc付近では
  完全超流体
  強く相互作用しているのにサラサラ！

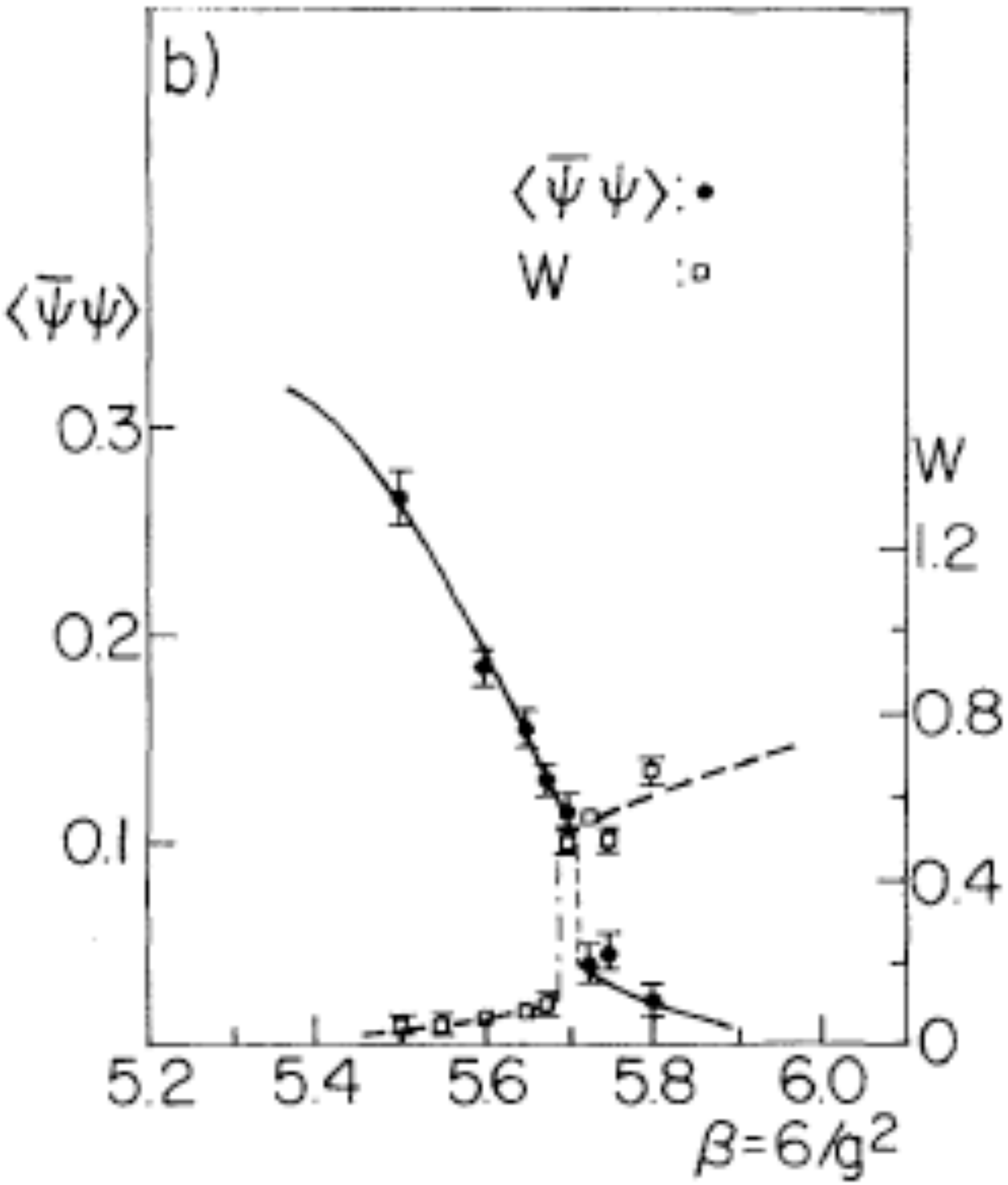
El and Y.Nagai (2020)



KSS bound (AdS/CFT, largeN)

$$\eta/s = 1/(4\pi)$$

(9) 閉じ込めとカイラル対称性の関係



quenched QCD

Z3 phase trans.(Td)

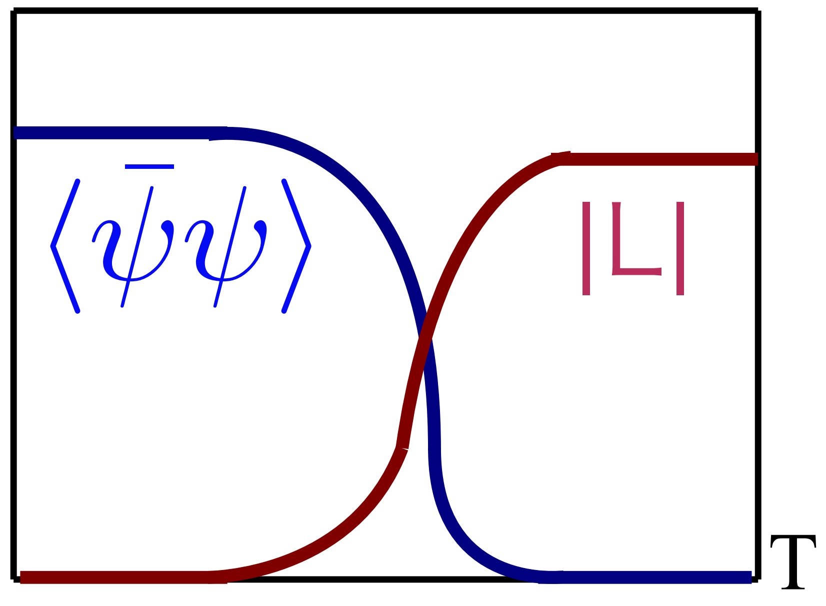
~ chiral phase trans.(Tc)

Kogut et. al. , Phys.Rev.Lett. 50 (1983) 393

(9) 閉じ込めとカイラル対称性の関係

Td (center sym.) and Tc (chiral sym.)

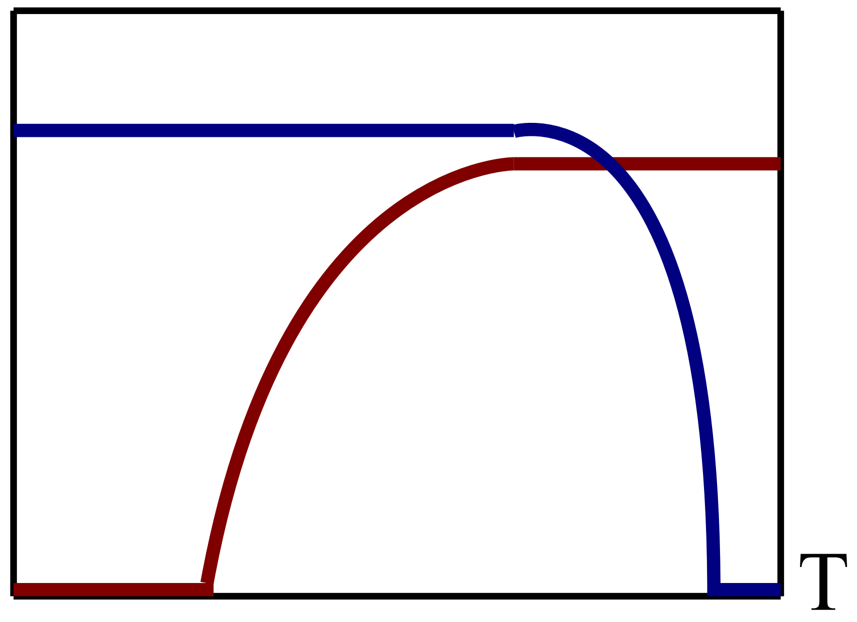
・quenched QCD
(center symmetric action)



Td~Tc

Kogut, et.al. (1983)

・Nf=2 massive adjoint fermion
(center symmetric)



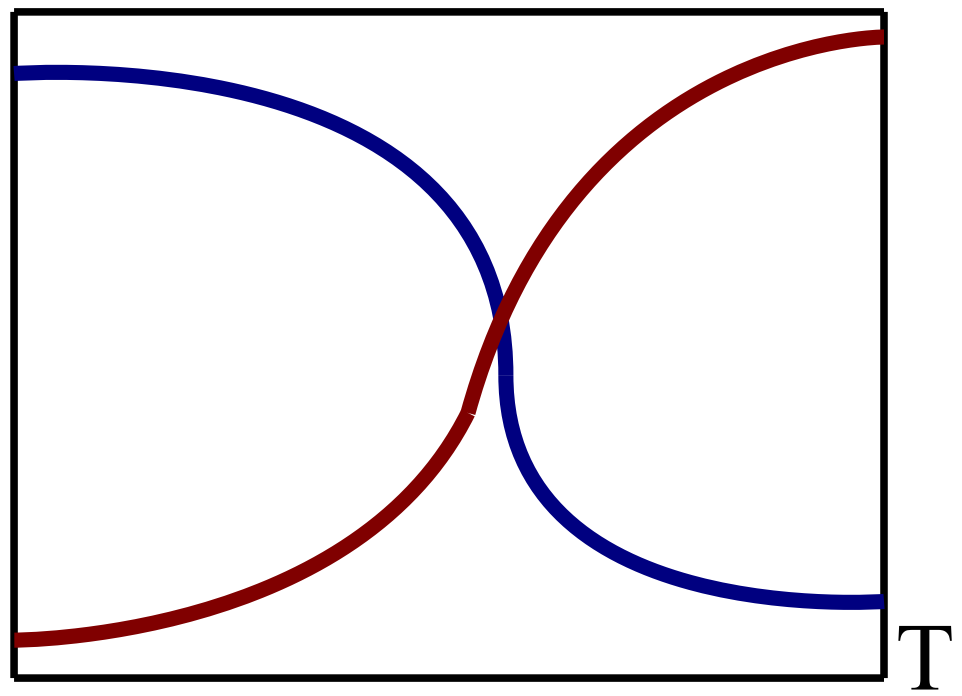
Td<Tc

Karsch, et.al. (1999)

cf.) adjoint reps.

$$U_A^{ab} = \mathrm{Tr}[U\lambda^a U^\dagger \lambda^b]$$

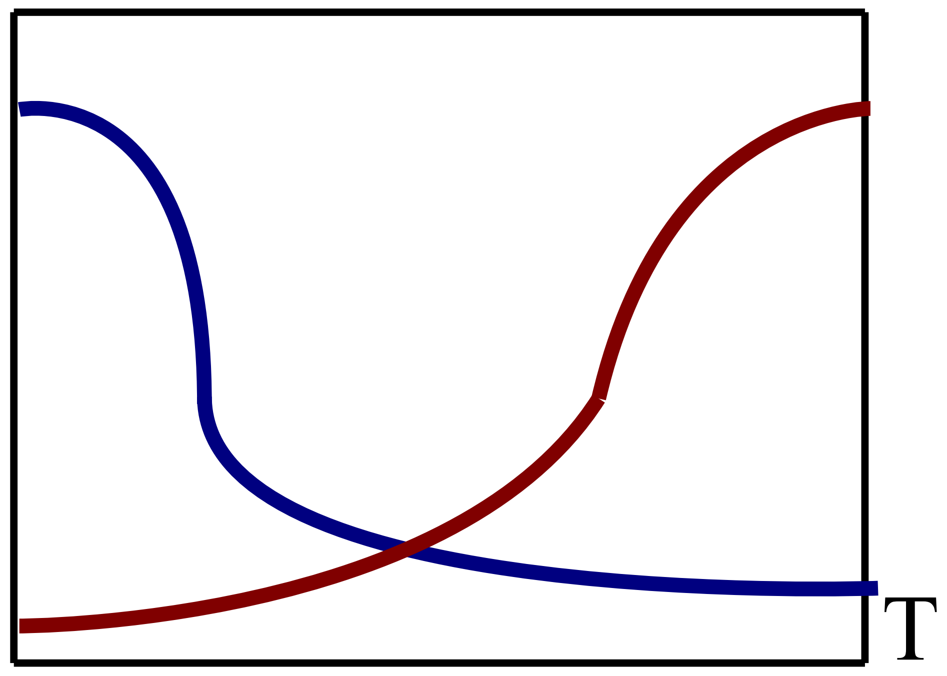
・Nf=2+1 fundamental fermions (no center symmetry in the action)



Nf=2+1LQCD (Z3×) HotQCD

Td~Tc

HotQCD collab.(2008)



Nf=2+1LQCD (Z3×) BMW

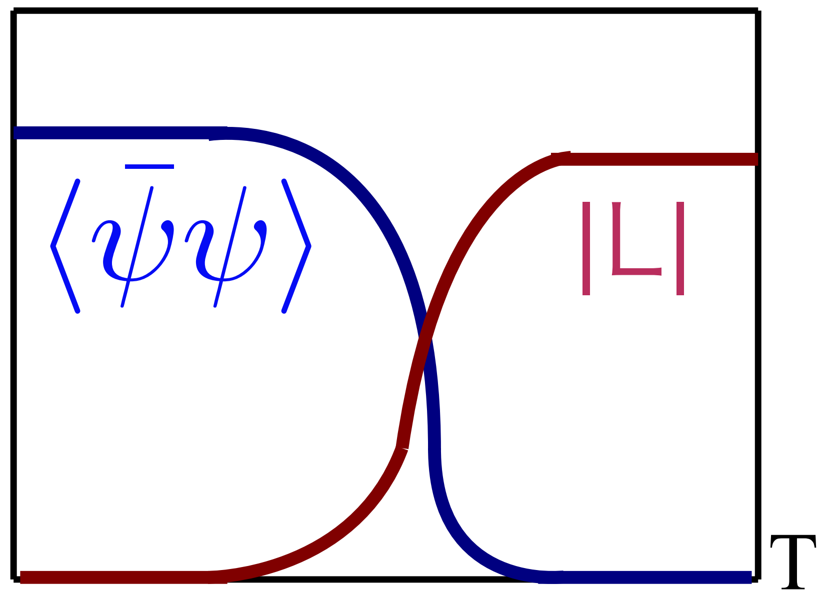
Td>Tc

Fodor, et.al.(2009)

(9) 閉じ込めとカイラル対称性の関係

Td (center sym.) and Tc (chiral sym.)

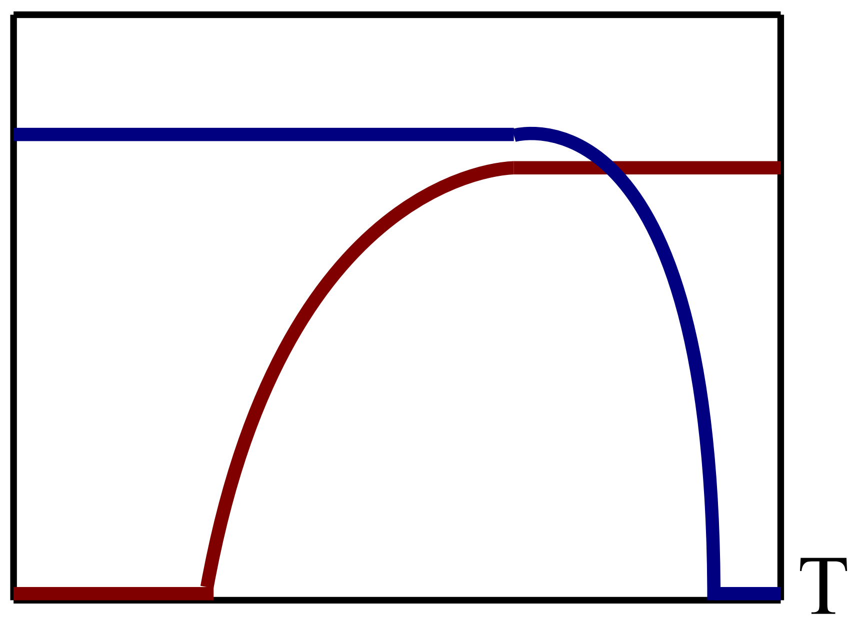
・quenched QCD
(center symmetric action)



Td~Tc

Kogut, et.al. (1983)

・Nf=2 massive adjoint fermion
(center symmetric)



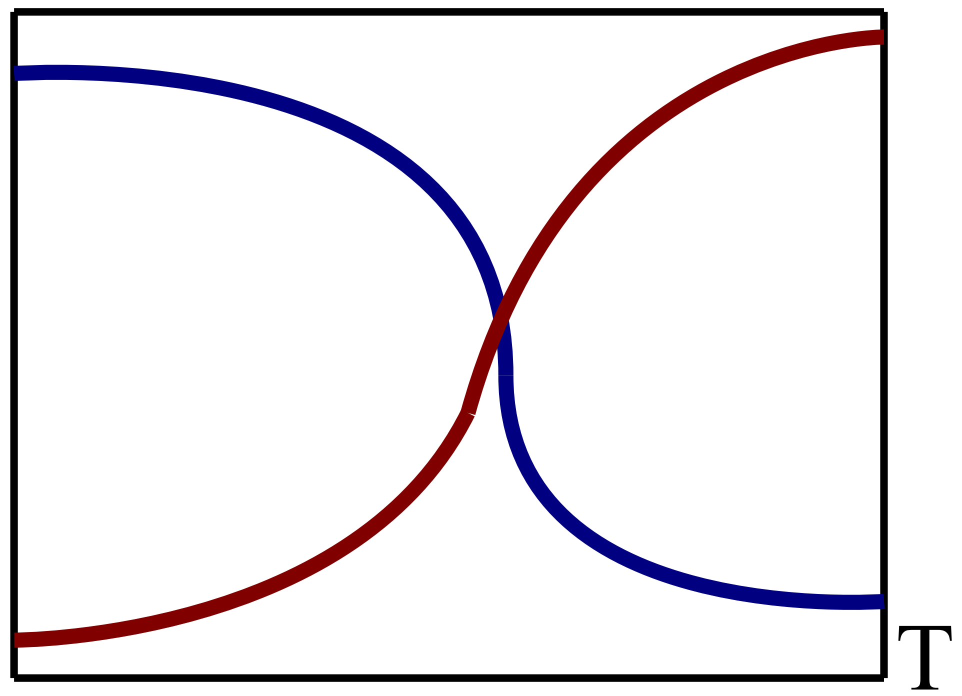
Td<Tc

Karsch, et.al. (1999)

cf.) adjoint reps.

$$U_A^{ab} = \mathrm{Tr}[U\lambda^a U^\dagger \lambda^b]$$

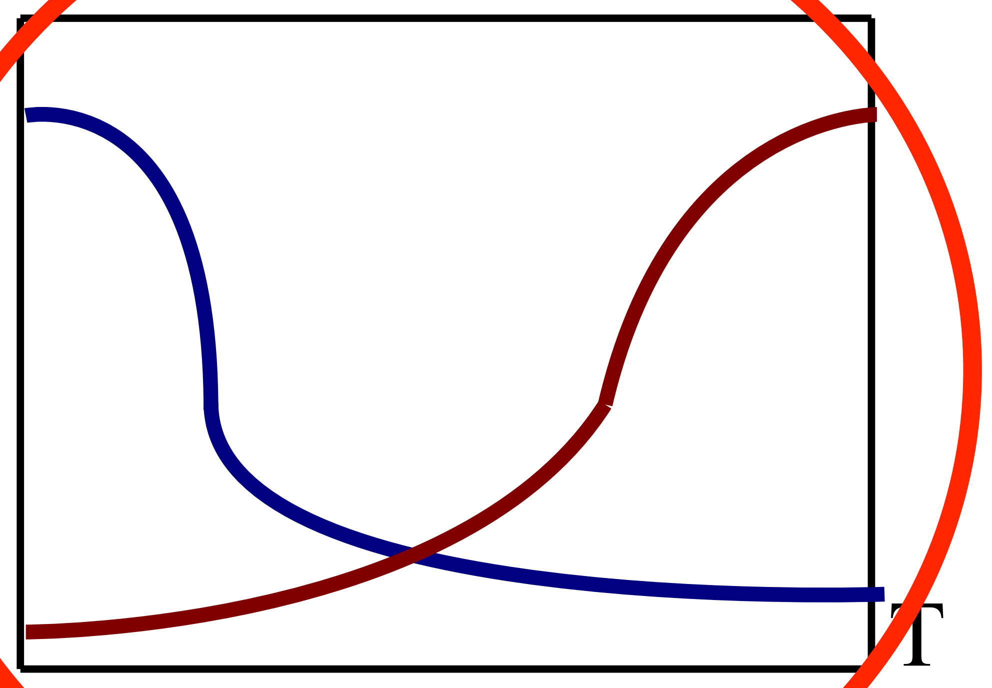
・Nf=2+1 fundamental fermions (no center symmetry in the action)



Nf=2+1LQCD (Z3×) HotQCD

Td~Tc

HotQCD collab.(2008)



Nf=2+1LQCD (Z3×) BMW

Td>Tc

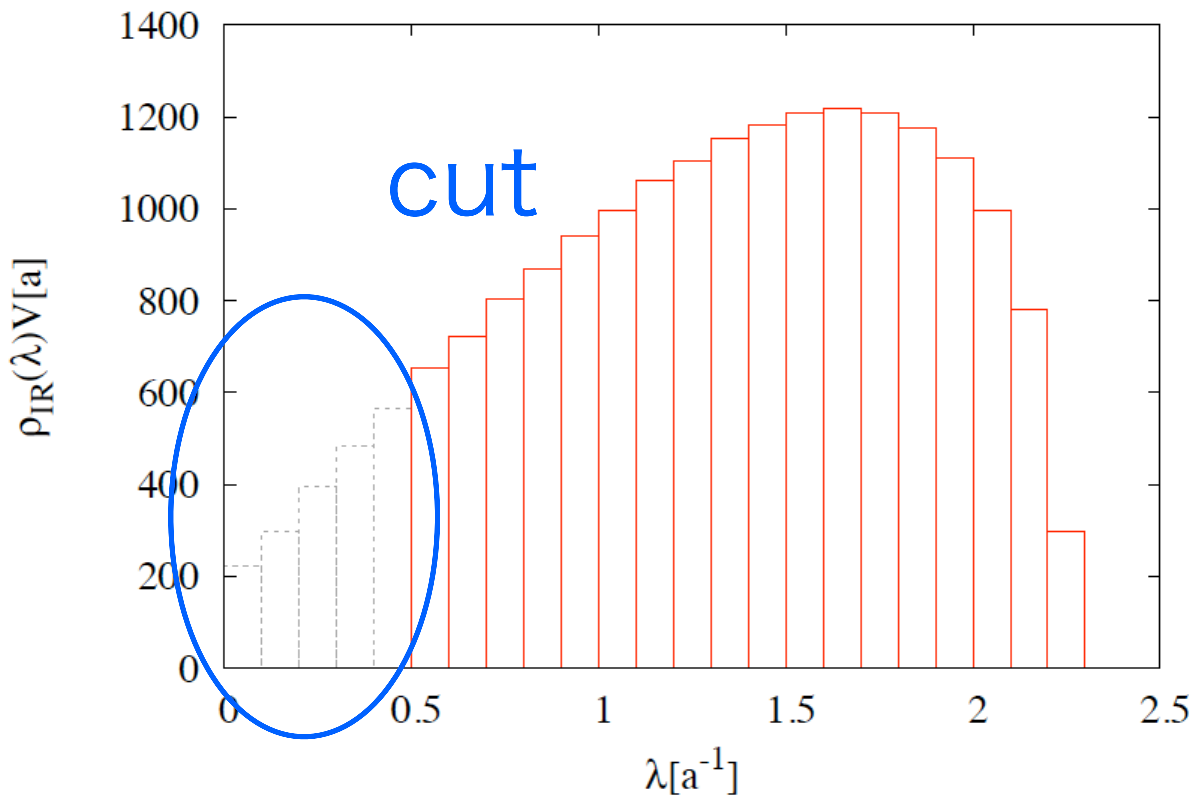
Fodor, et.al.(2009)

(9) 閉じ込めとカイラル対称性の関係(Z3-QCD)

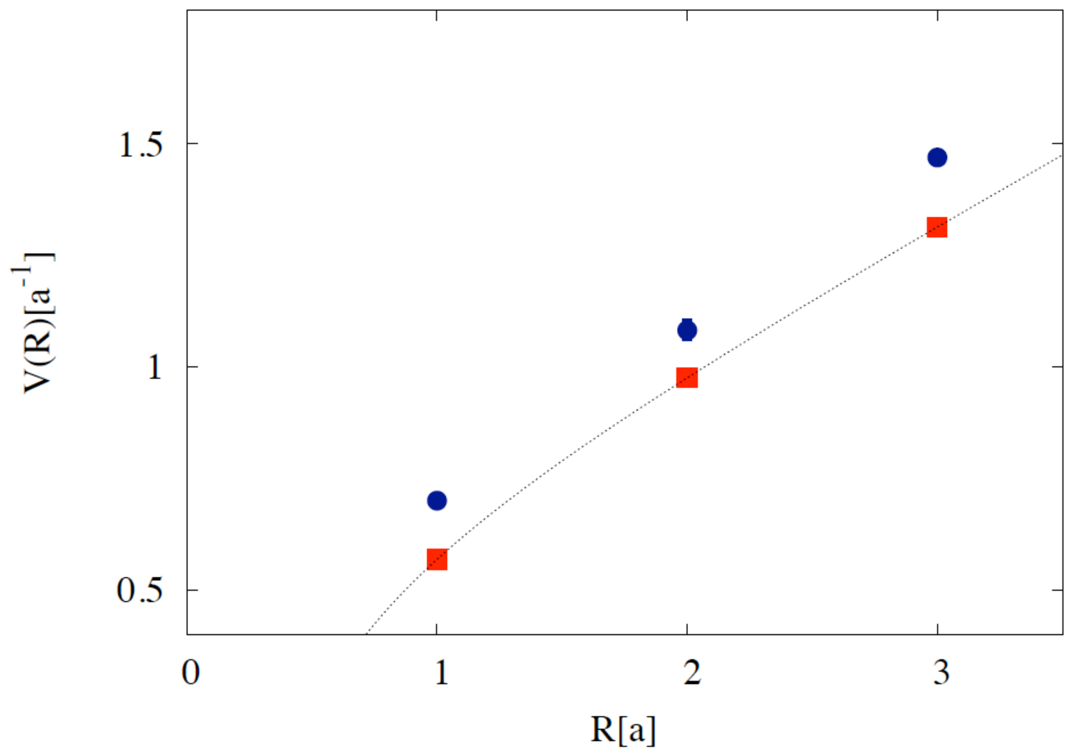
Gongyo, Iritani and Suganuma
PRD86 (2012)034510

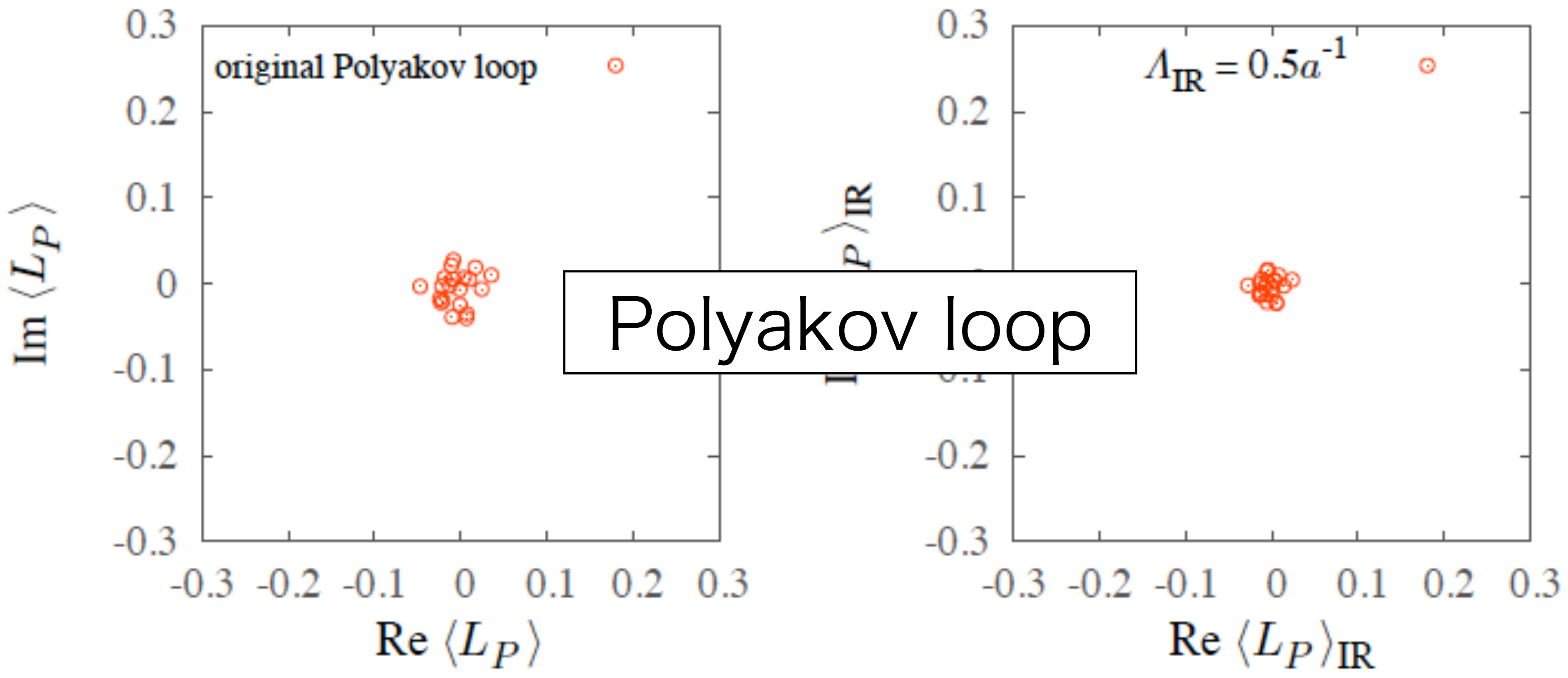
Dirac eigenvalue

$$D(x,y)\psi(y) = i\lambda\psi(x)$$



q-qbar potential

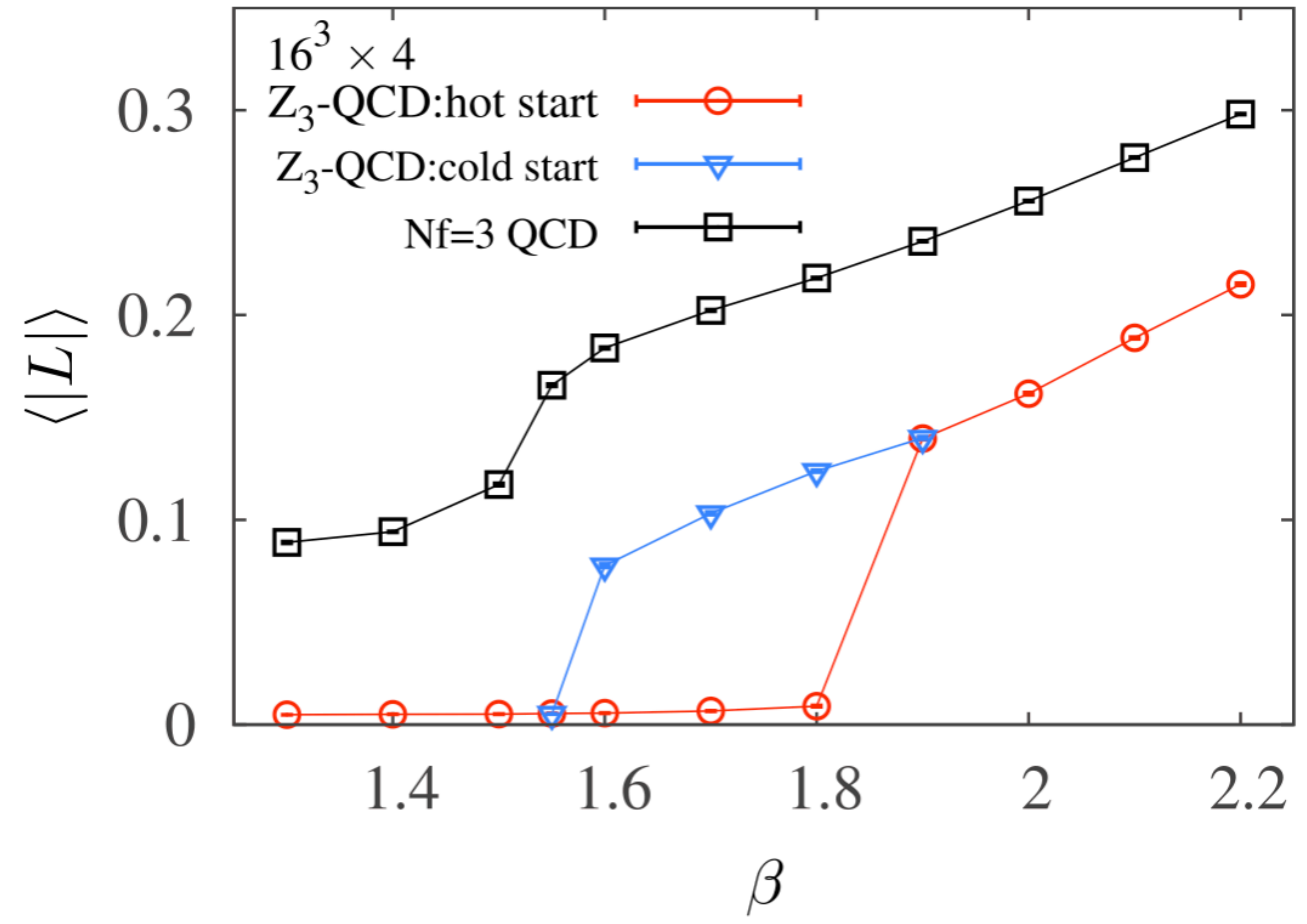




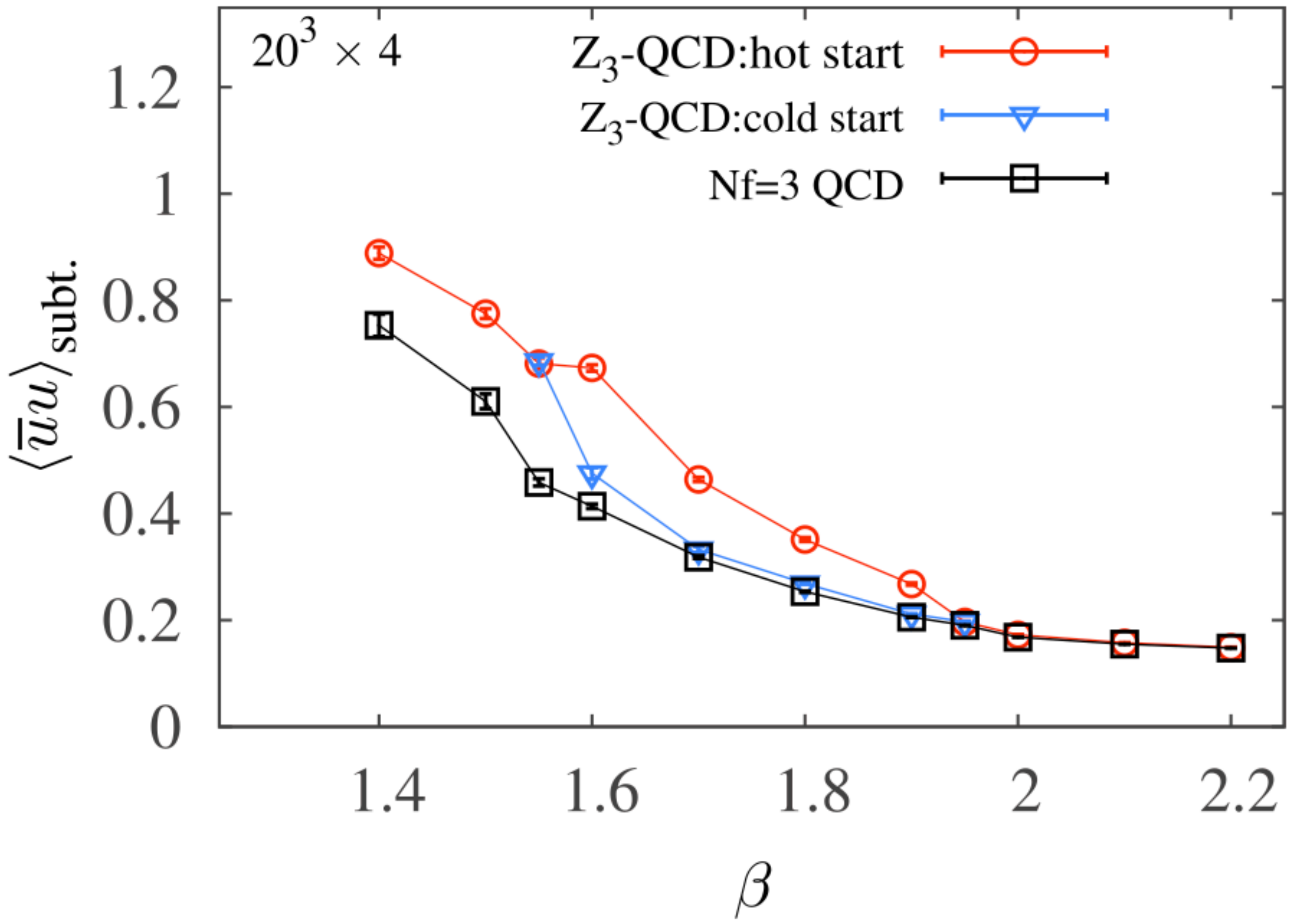
- カイラル対称性はBanks-Casher関係式からDirac op.のlow modeと関係
- mode展開してlow modeをcutした配位してq-qbar potentialやPolyakov loopは変わるか？
  => 変わらない
  (ただし、配位はquenched QCD)

(9) 閉じ込めとカイラル対称性の関係(Z3-QCD)

T.Iritani, EI, T.Misumi(2015)



cold start : U=1
hot start : U=random



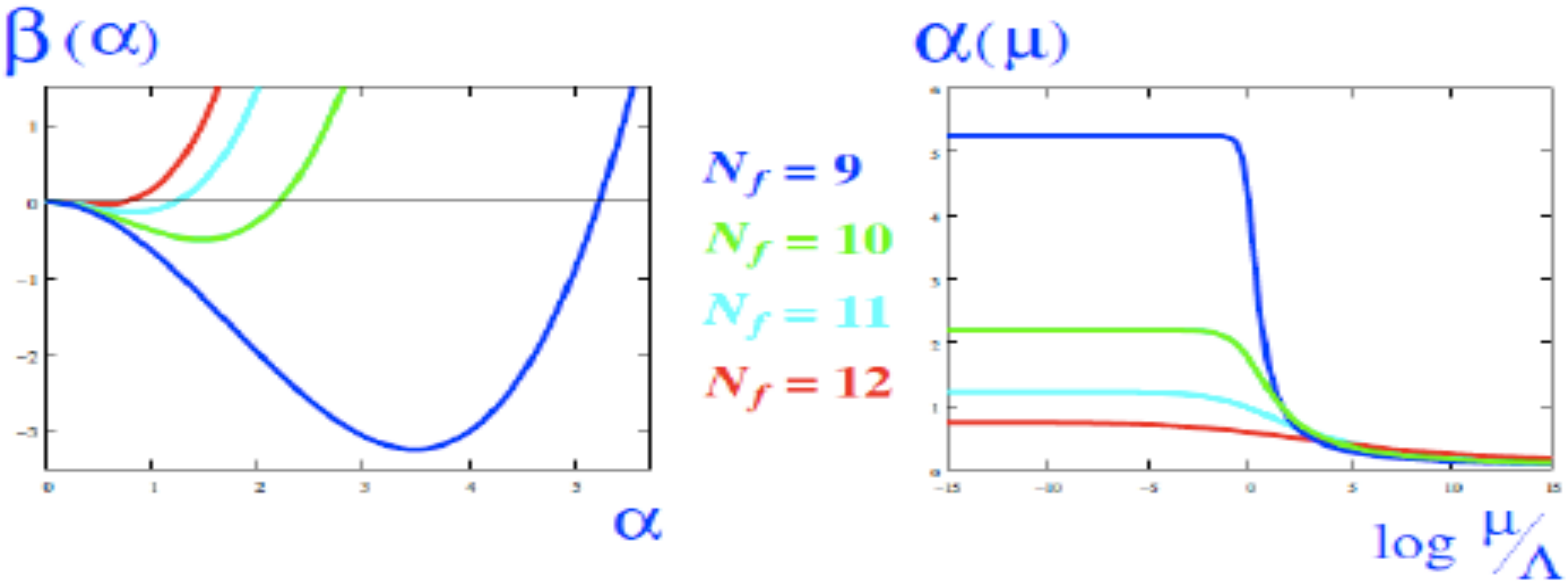
- fundamental quarkがいても中心対称性を保つ理論を作って
  閉じ込めとカイラル対称性の両方を厳密に議論したら？
- quarkの温度方向の境界条件をflavor依存にして、Z3変換+flavor変換で理論が不変になるモデル
  (Z3-QCD, 九大グループ)
- 同時に１次相転移が起こる

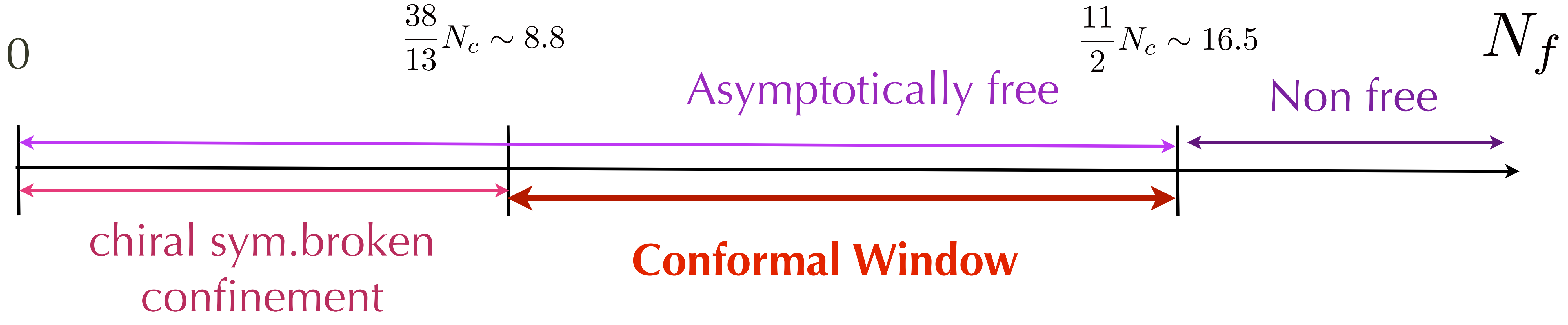
(10) conformal window

IRで相互作用を持つCFTゲージ理論

Nf-flavor massless SU(3)ゲージ理論を考える

摂動論2loop β関数：$\beta(\alpha)=-b\alpha^2-c\alpha^3$





perturbative (MS bar scheme)

	2-loop	3-loop	4-loop
(alpha)	0.75	0.44	0.47
(g^2)	9.4	5.5	5.9

T.A.Ryttov and R.Shrock,
Phys.Rev.D83,056011 (2011)

S-D eq. with large Nc

$$N_f^{cr}=11.9$$

Exact RG

$$N_f^{cr}=10.0^{+1.6}_{-0.7}$$

H.Gies and J.Jaeckel,
Eur.Phys.J. G46:433-438,2006

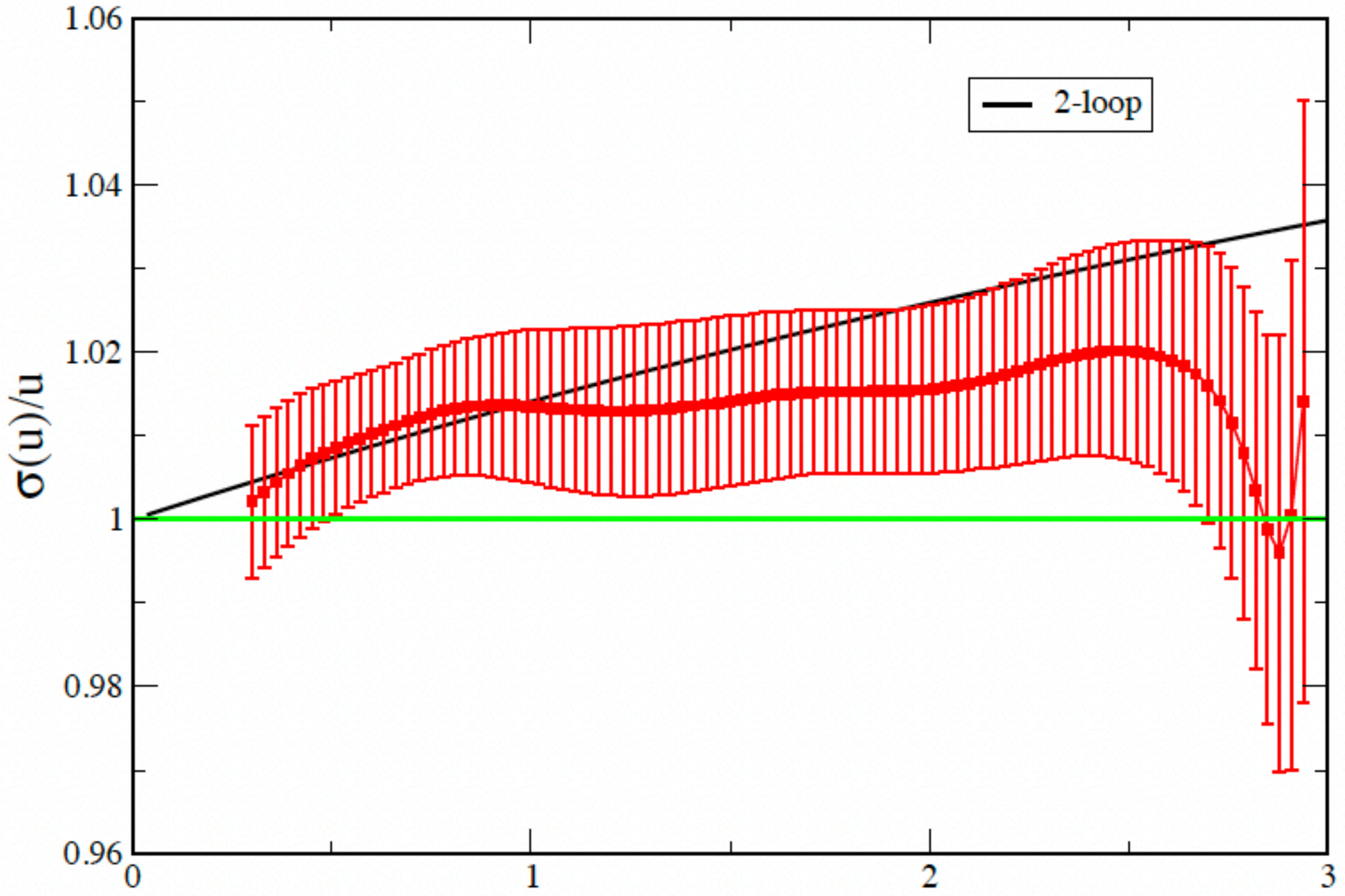
Exact RG (+ 4 fermi interaction)

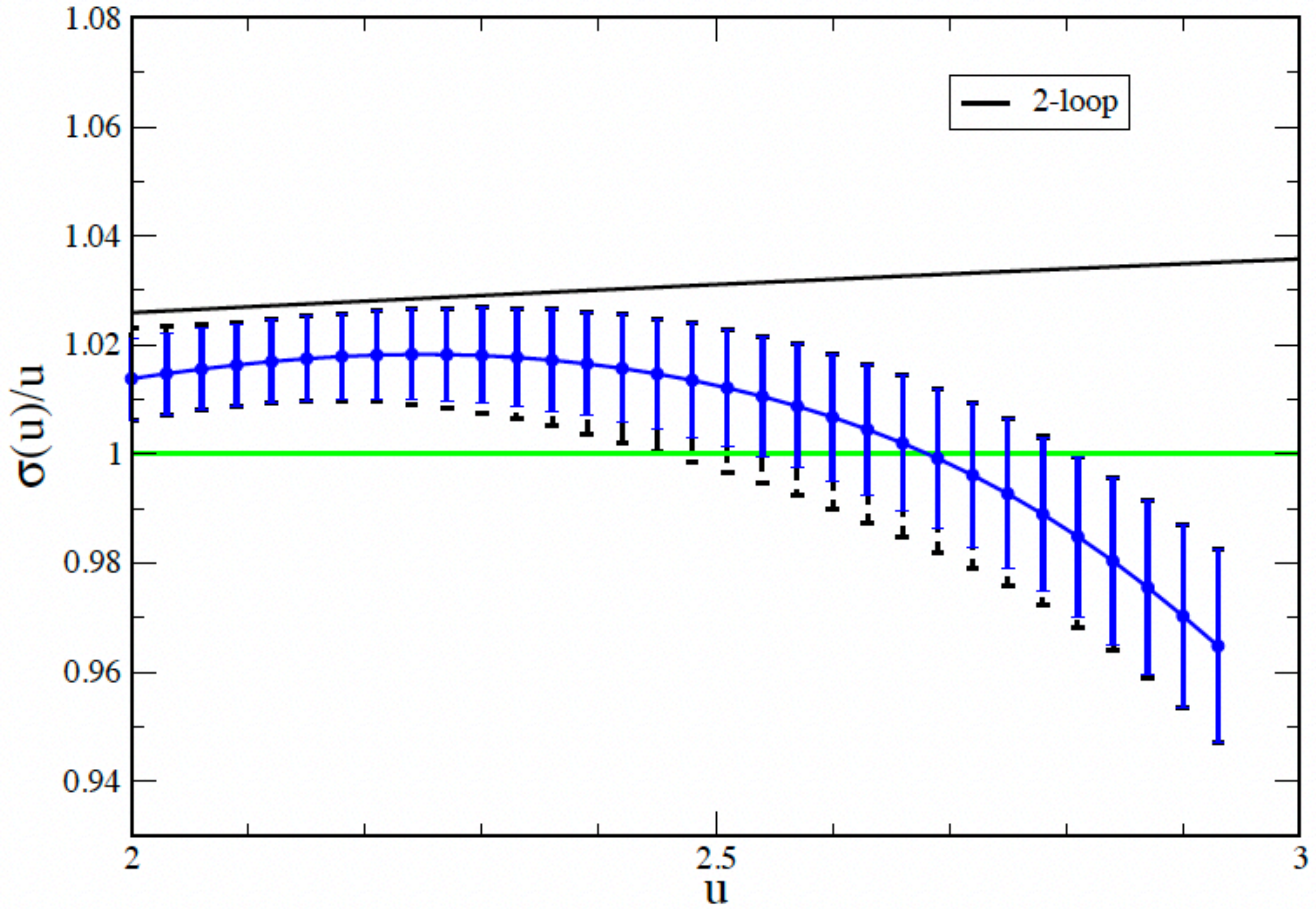
$$N_f^{cr}=11.58$$

Y.Kusafuka and H.Terao,
arXiv:1104.3606 [hep-ph]

(10) conformal window

離散的なbeta関数の測定

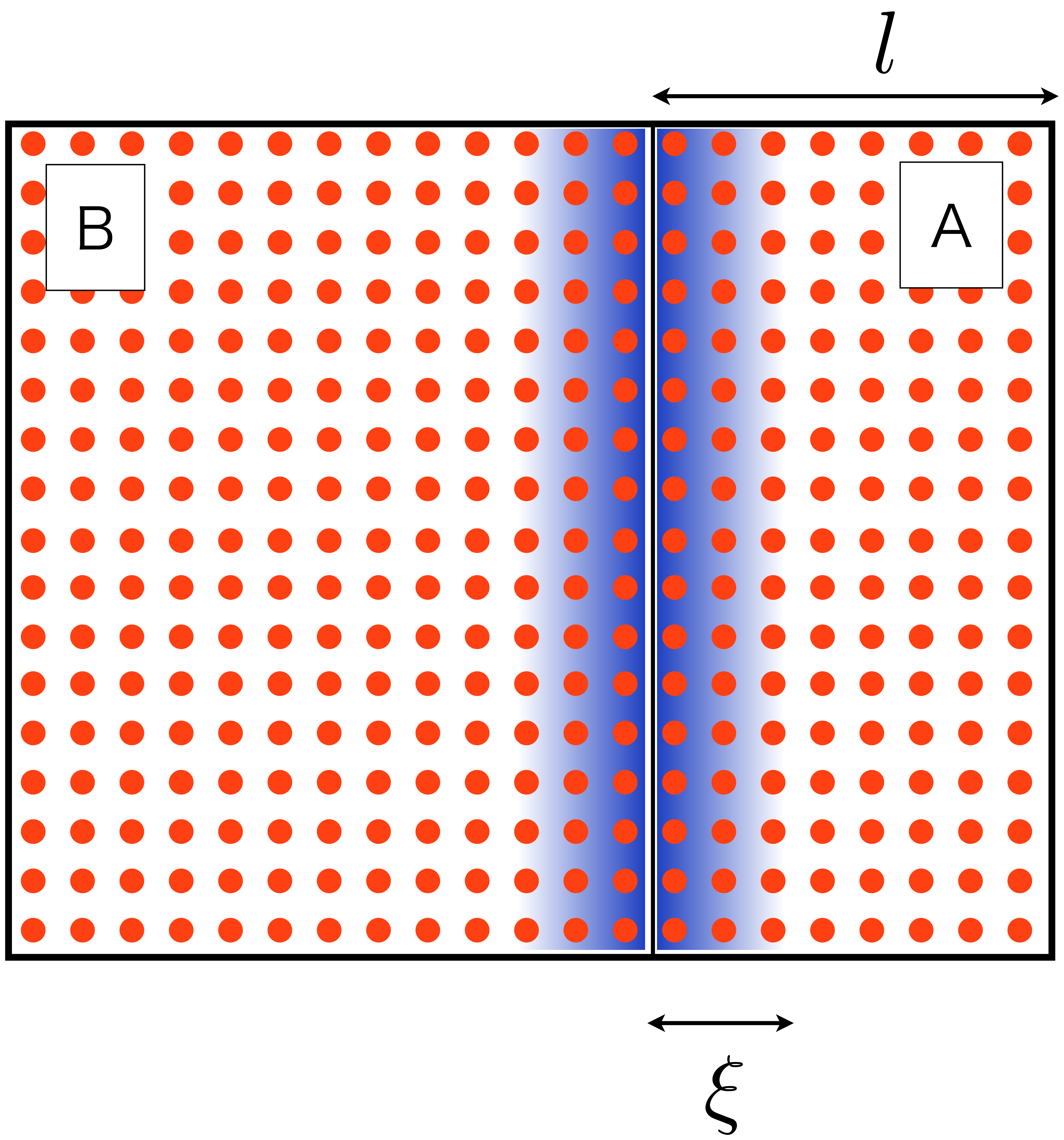




EI(2013)

- 格子シミュレーションで非摂動的なbeta関数を計算
- beta関数はスキームに依存するが、固定点の存在はスキームに非依存
  臨界指数もユニバーサル
- Nf=12, massless SU(3)はIR fixed pointがある？ない？
  ＝＞ある！
- 相関関数の計算から臨界指数も計算できた

(11) 閉じ込めとエンタングルメント・エントロピー



reduced density matrix

$$\rho_A = -\mathrm{Tr}_{\mathcal{H}_B}\rho_{tot}$$

entanglement entropy

$$S_A = -\mathrm{Tr}_A \rho_A \log \rho_A$$

エントロピックC関数

two dim.

$$C(l) = l\frac{dS}{dl}$$

CFTでは、central chargeに比例

four dim.

$$C(l) = l^3 \frac{1}{|\partial A|}\frac{dS}{dl}$$

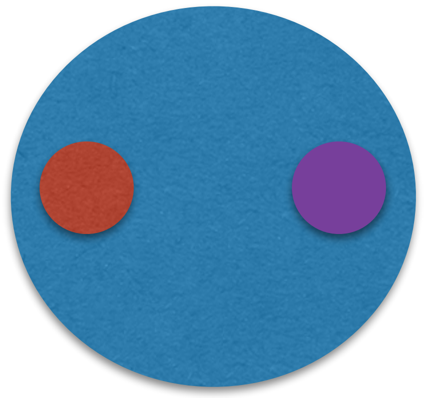
(11) 閉じ込めとエンタングルメント・エントロピー

QCD (T=0)

A color confinement changes the
d.o.f of the system

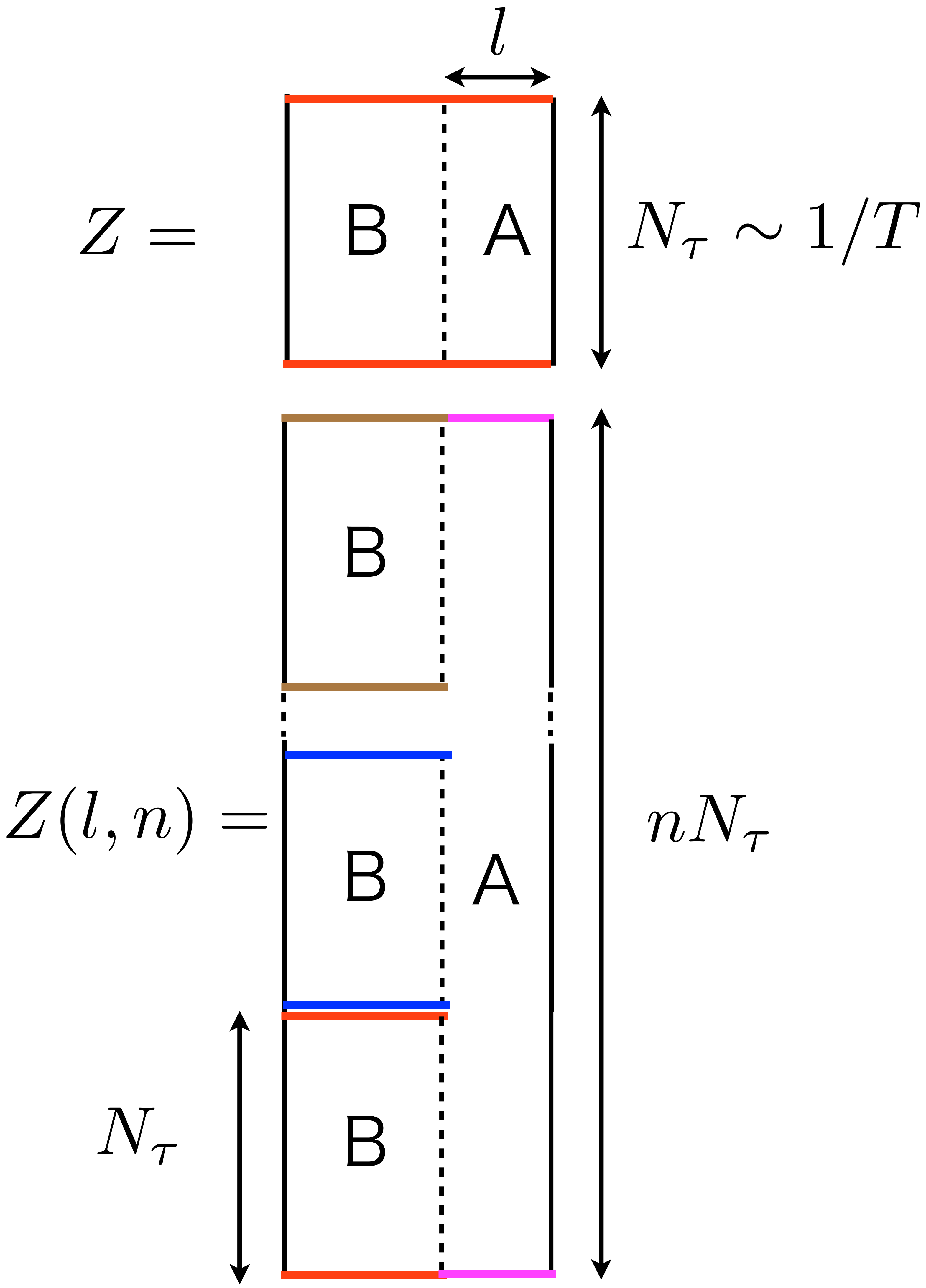
microscopically Λ_{QCD} macroscopically

colorful
(gluons) $\sim O(N_c^2)$



colorless $\sim O(1)$
(singlet)

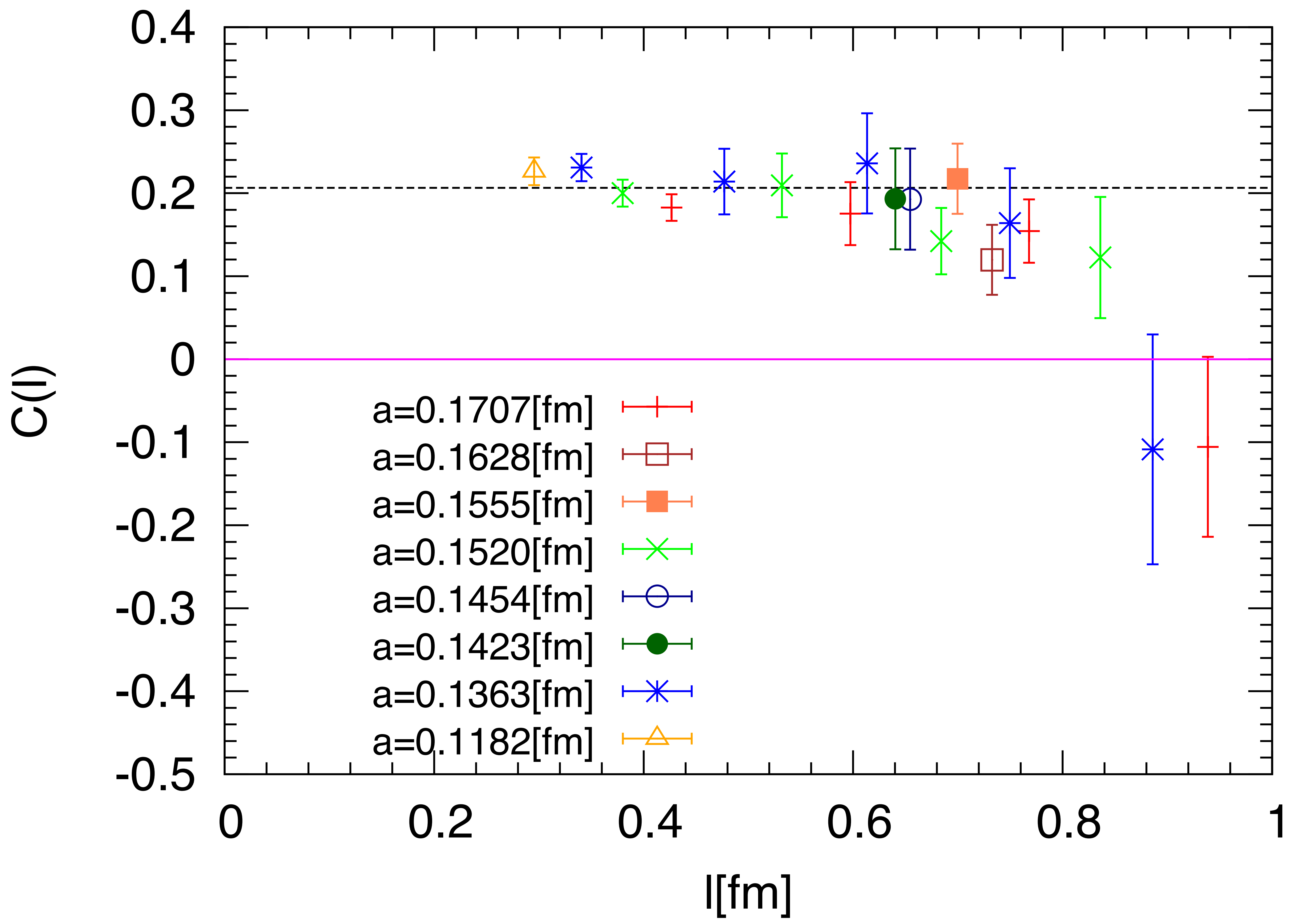
replica lattice



(11) 閉じ込めとエンタングルメント・エントロピー

SU(3)ゲージ理論のentropic c-関数

$$C(l) = l^3 \frac{1}{|\partial A|} \frac{dS}{dl}$$



Λ_{QCD}でc-関数に変化が見られる

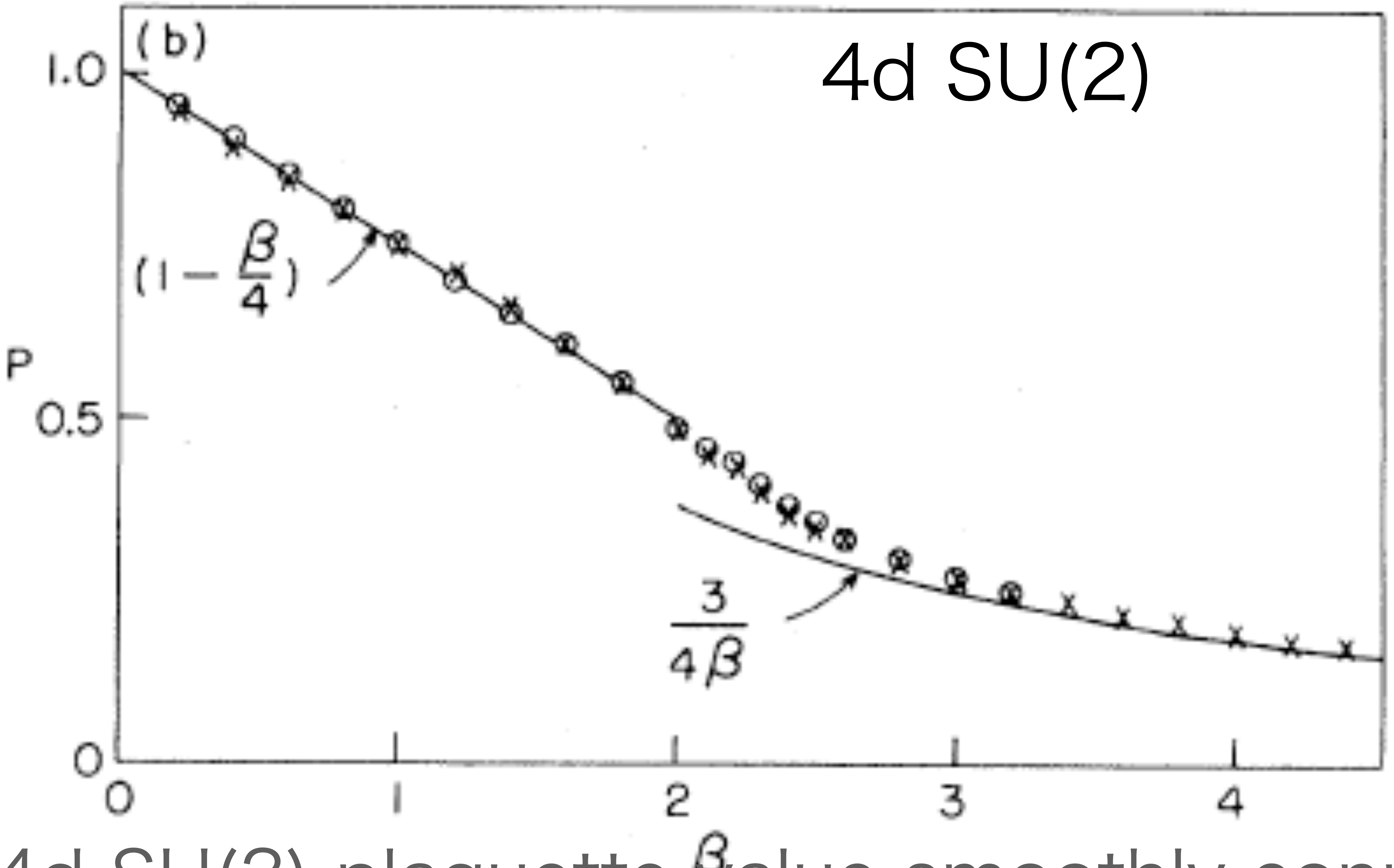
$$\frac{1}{\Lambda_{QCD}} \sim 0.7[\mathrm{fm}]$$

近距離でのcの値: $C_{\mathrm{gauge}} \sim 0.2064$は、
AdS/CFTの自由実スカラー理論での値 c'~0.0049に
ゲージ場の自由度: 2c' x 2(偏光) x 8 (カラー) ~ 0.1568
にほぼ一致

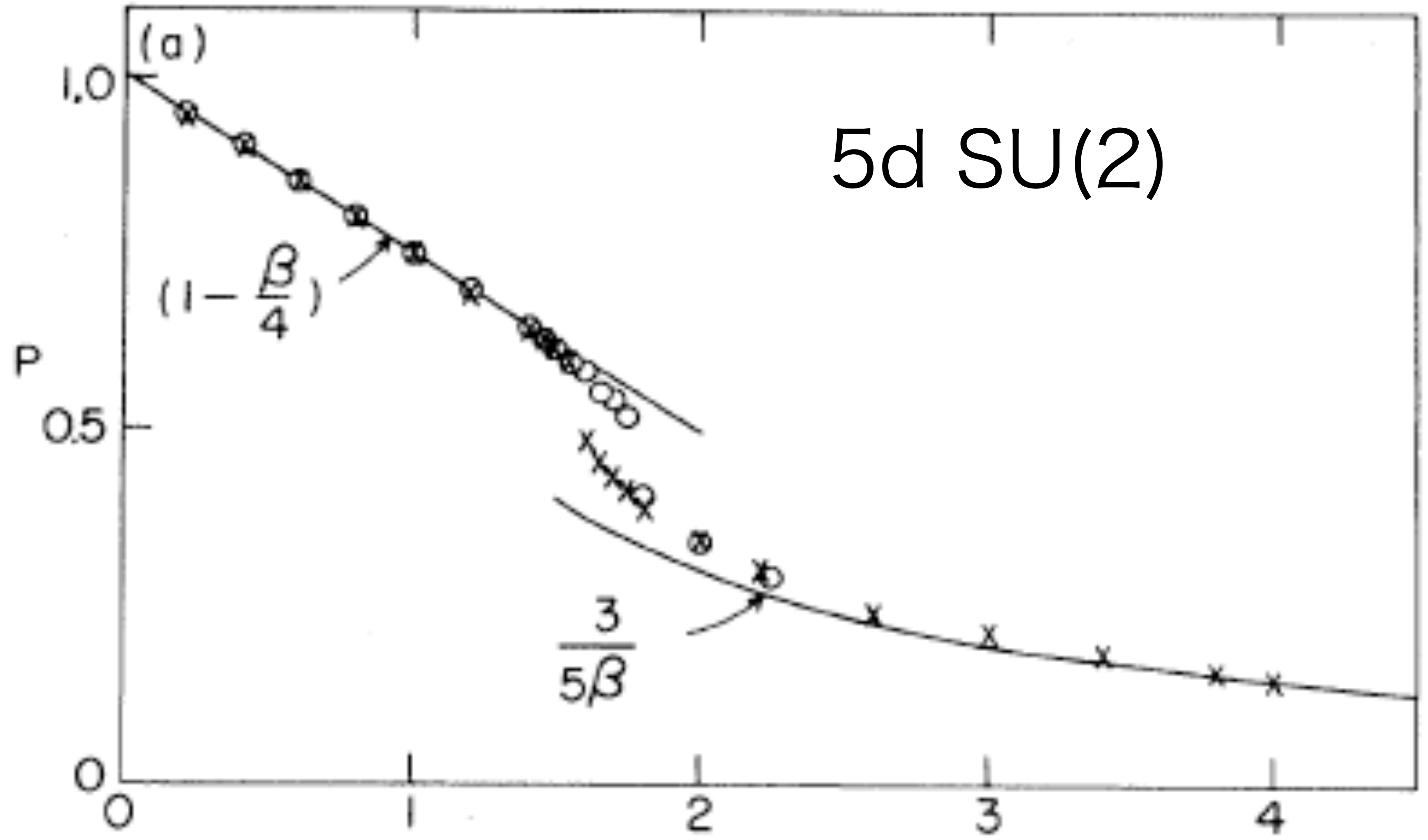
(12) なぜ我々の世界は４次元か？

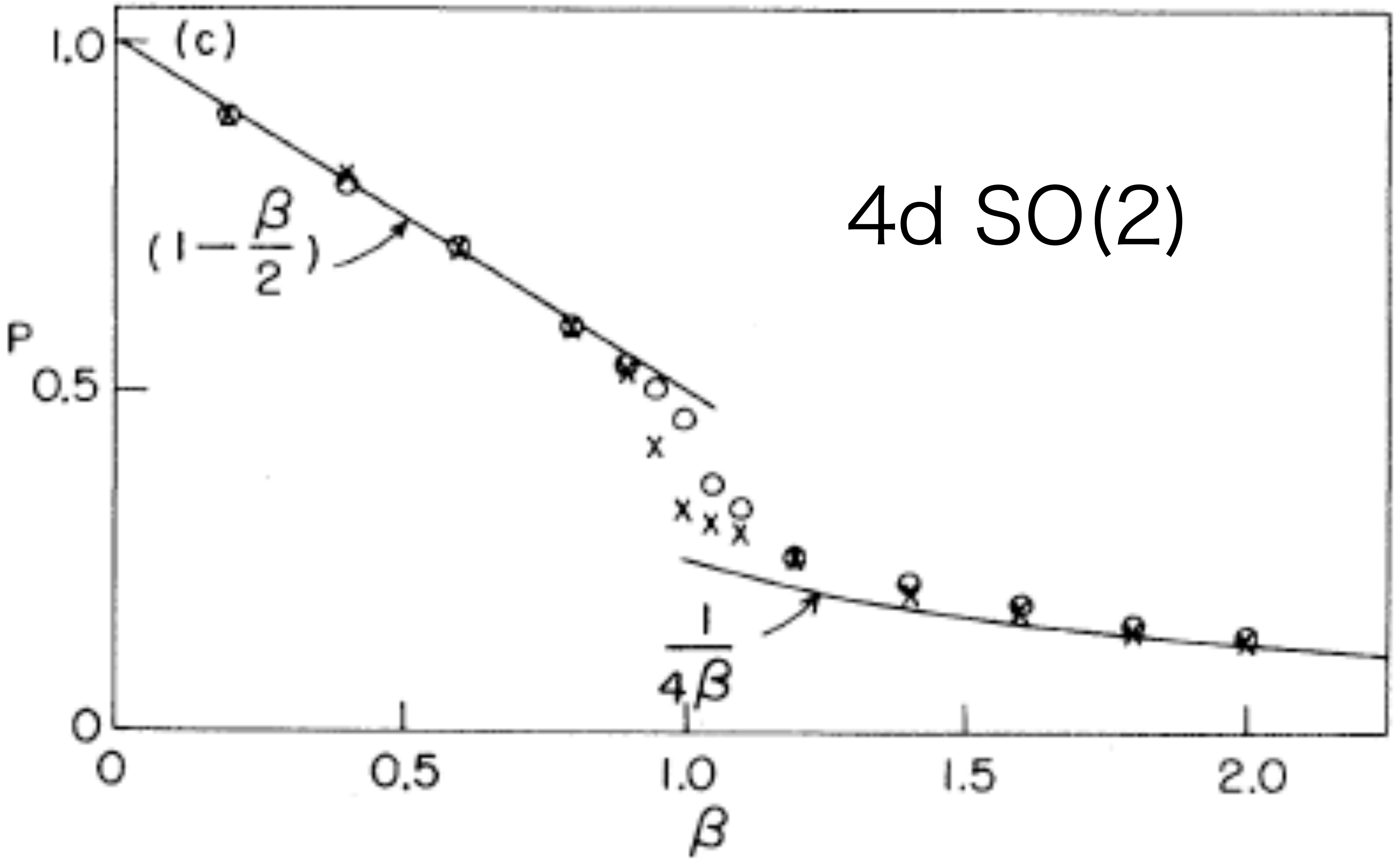
非可換ゲージ理論の臨界次元

Michael Creutz (1979)



4d SU(2) plaquette value smoothly connects between weak and strong coupling region
But, there are 1st order phase transition in the cases of 5d SU(2). It also happens in 4d SO(2)~U(1).





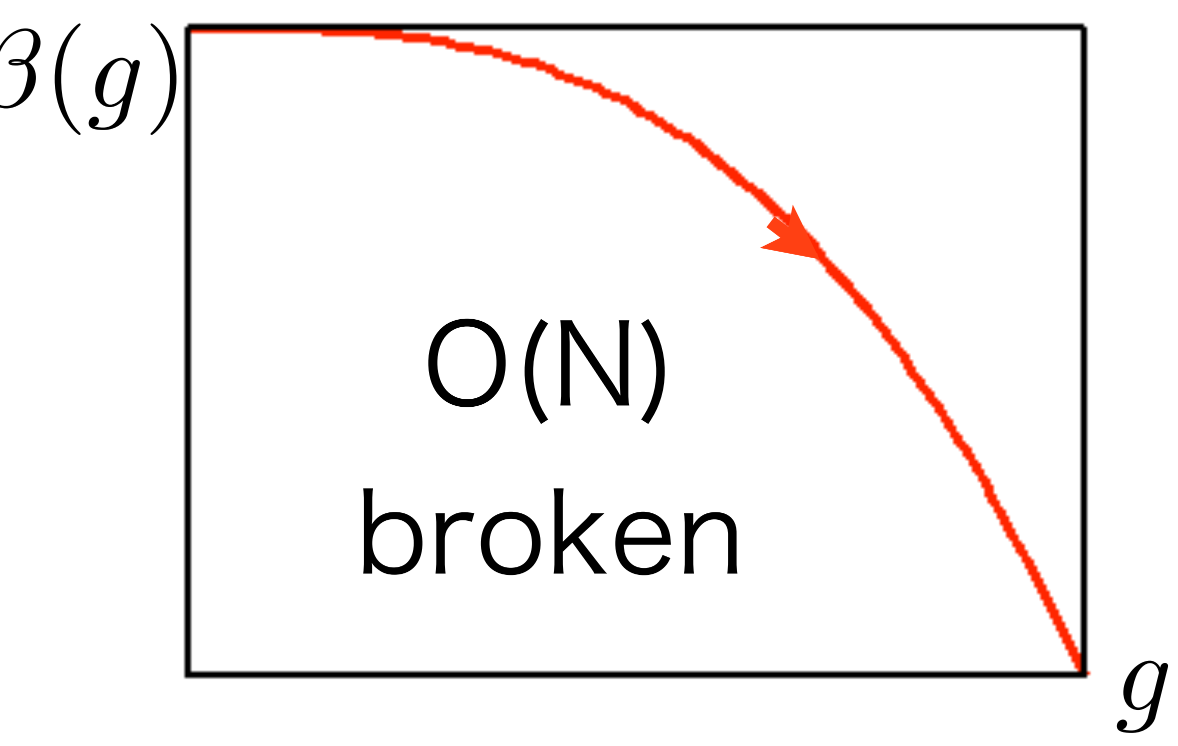
(12) なぜ我々の世界は４次元か？

Kawai-Nio-Okamoto(1992)

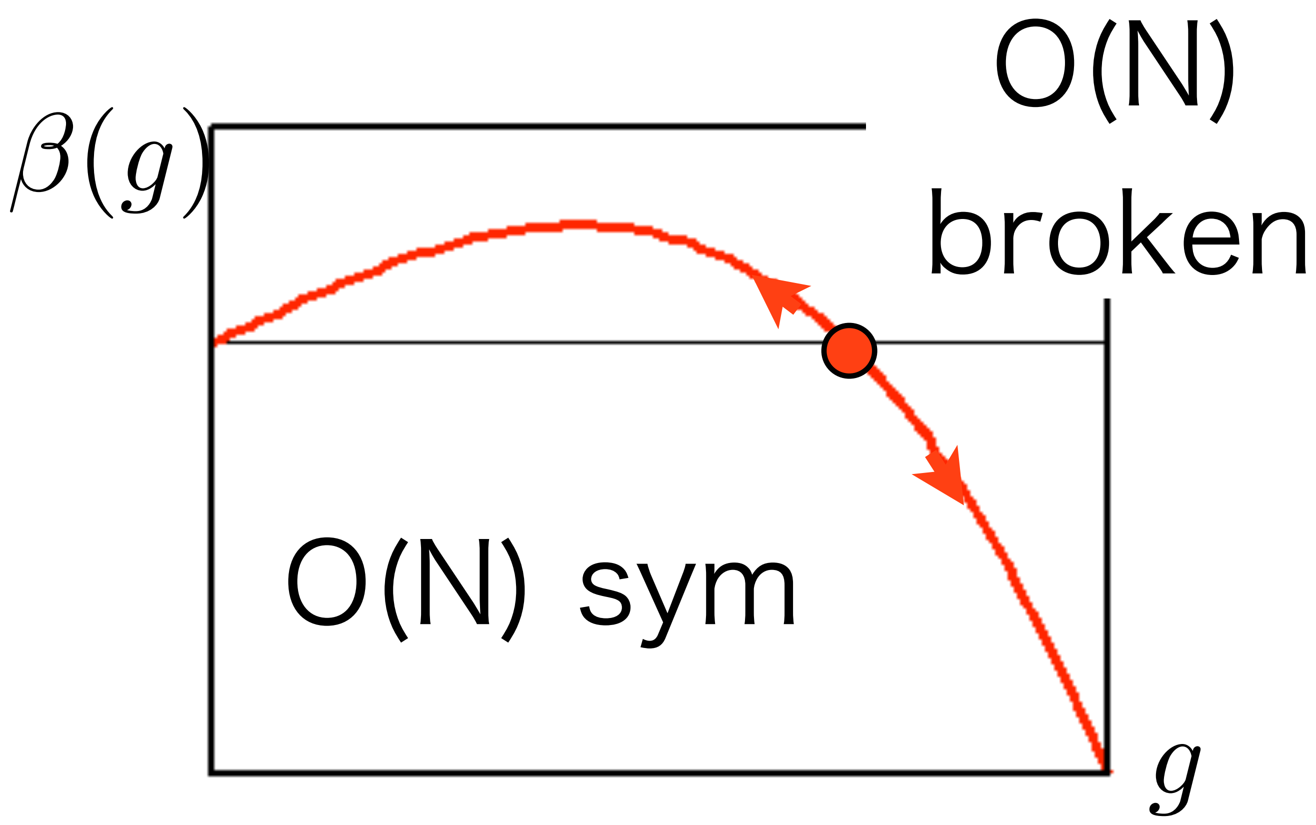
2-dim O(N) nonlinear sigma model is a toy model of 4-dim. non-abelian gauge theory

Expected beta function for the non-abelian gauge theory in d=4+ε.

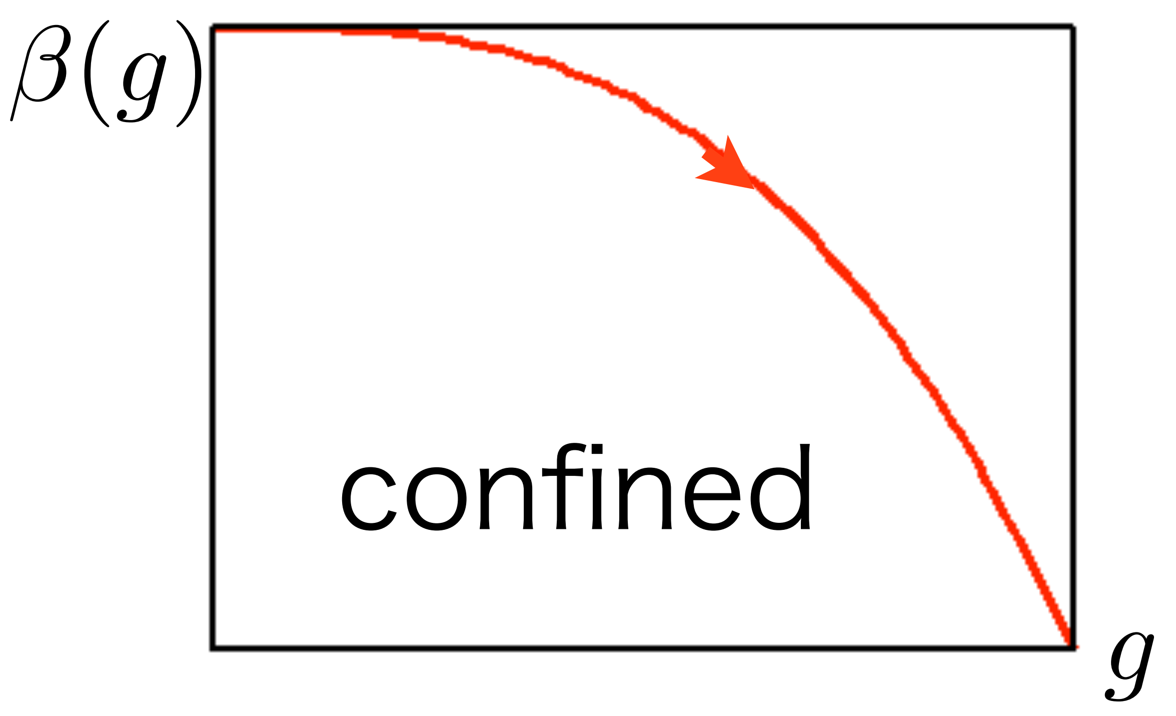
d=2



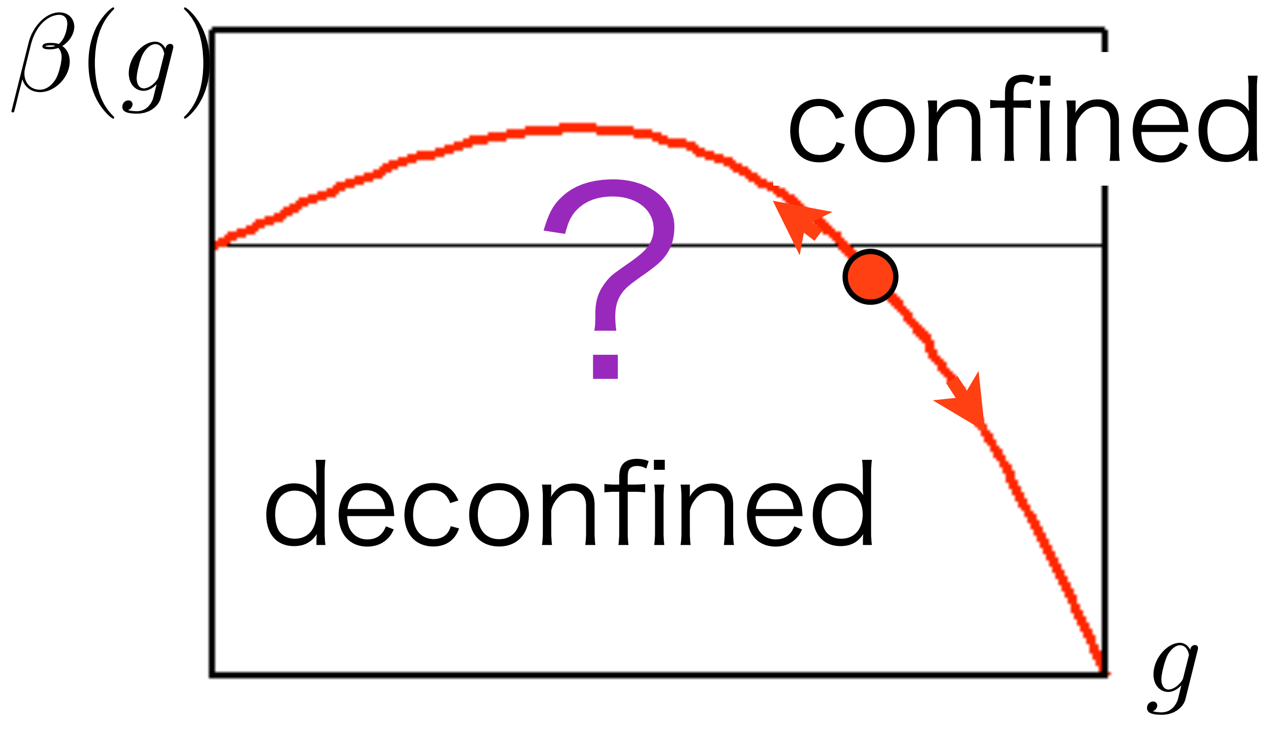
d=2+ε



d=4



d=4+ε



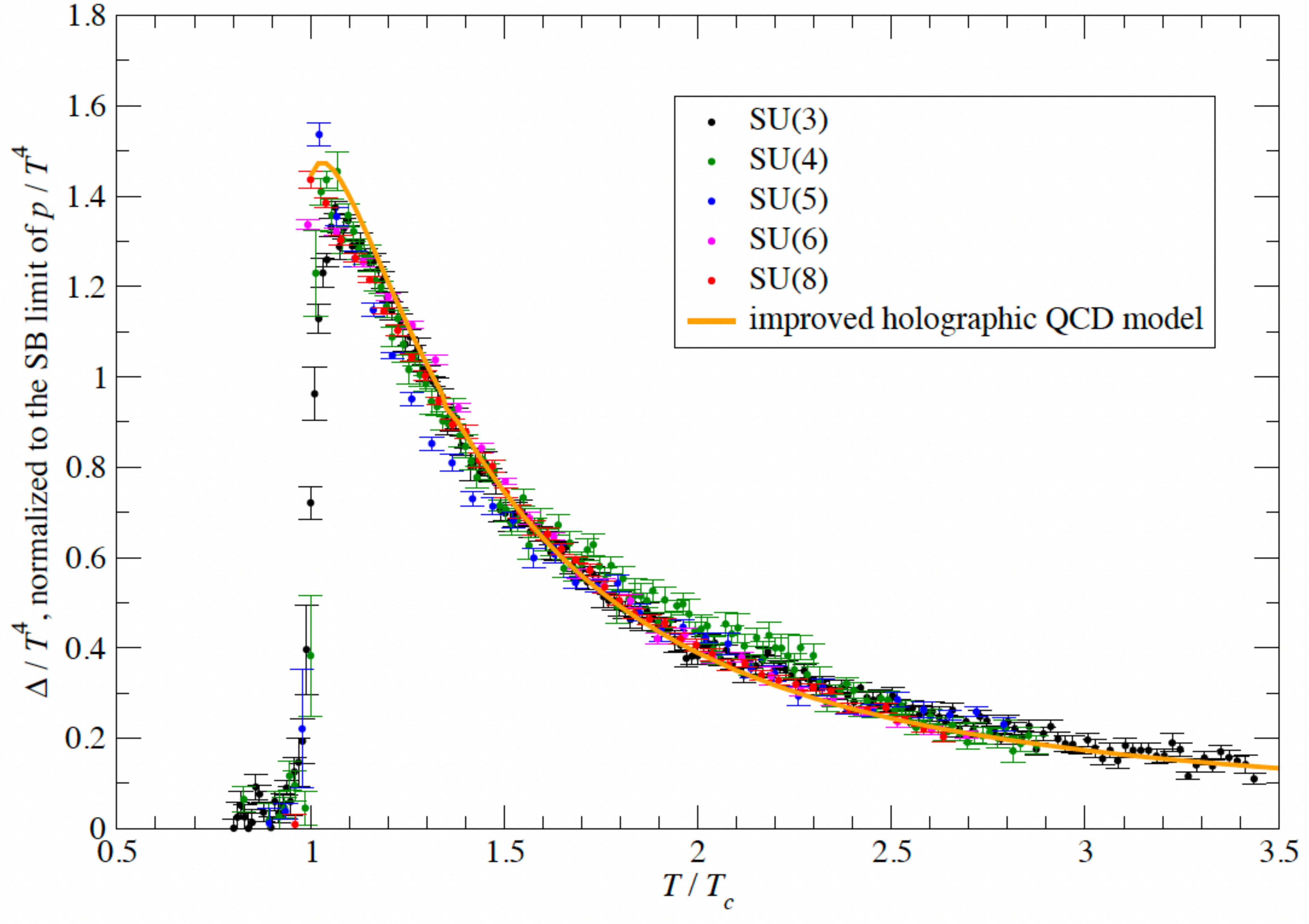
- asymptotically free
- O(N) sym is broken

- UV nontrivial fixed point
- 2nd order phase trans.
  O(N) sym/broken

- asymptotically free
- confined phase

- UV nontrivial fixed point?
- 2nd order phase transition?
  confined/deconfined?

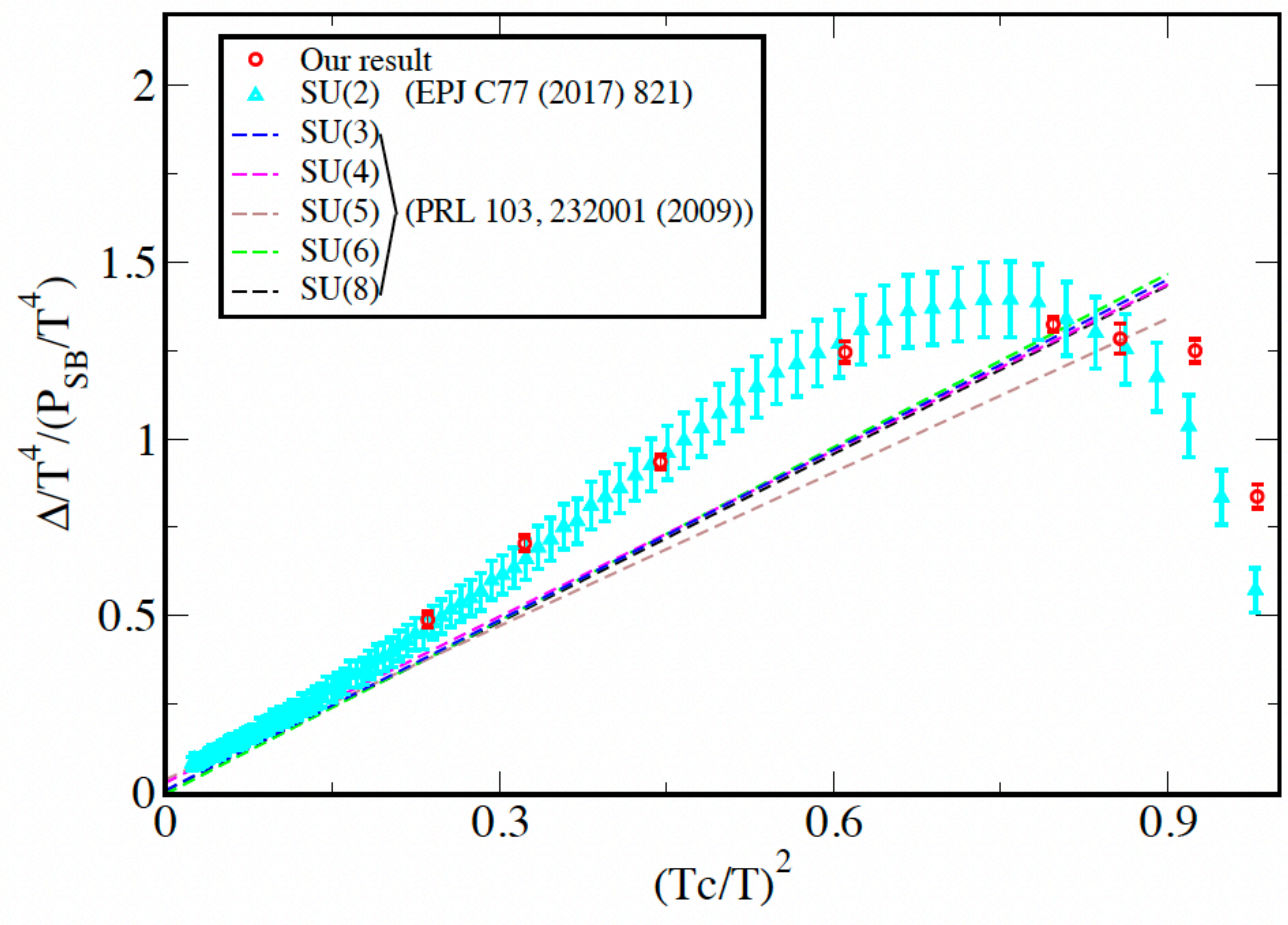
(13) SU(N)ゲージ理論のN依存性：3 = ∞?



M.Panero(2009)

- 有限温度相転移した時の熱力学量(trace anomaly, e-3p)をSU(N)ゲージ理論(pure YM)について調べた
- グルオンの自由度で規格化しておくと $N \geq 3$ では2%くらいで一致！！
  N依存性が無いということはN=3は既にlarge-N?
- $N \geq 3$の時はZ_N中心対称性の相転移は1次相転移
  $N = 2$の時はZ_2中心対称性で，２次相転移
  (critical Isingのユニバーサリティクラス)

(13) SU(N)ゲージ理論のN依存性：3 = ∞?



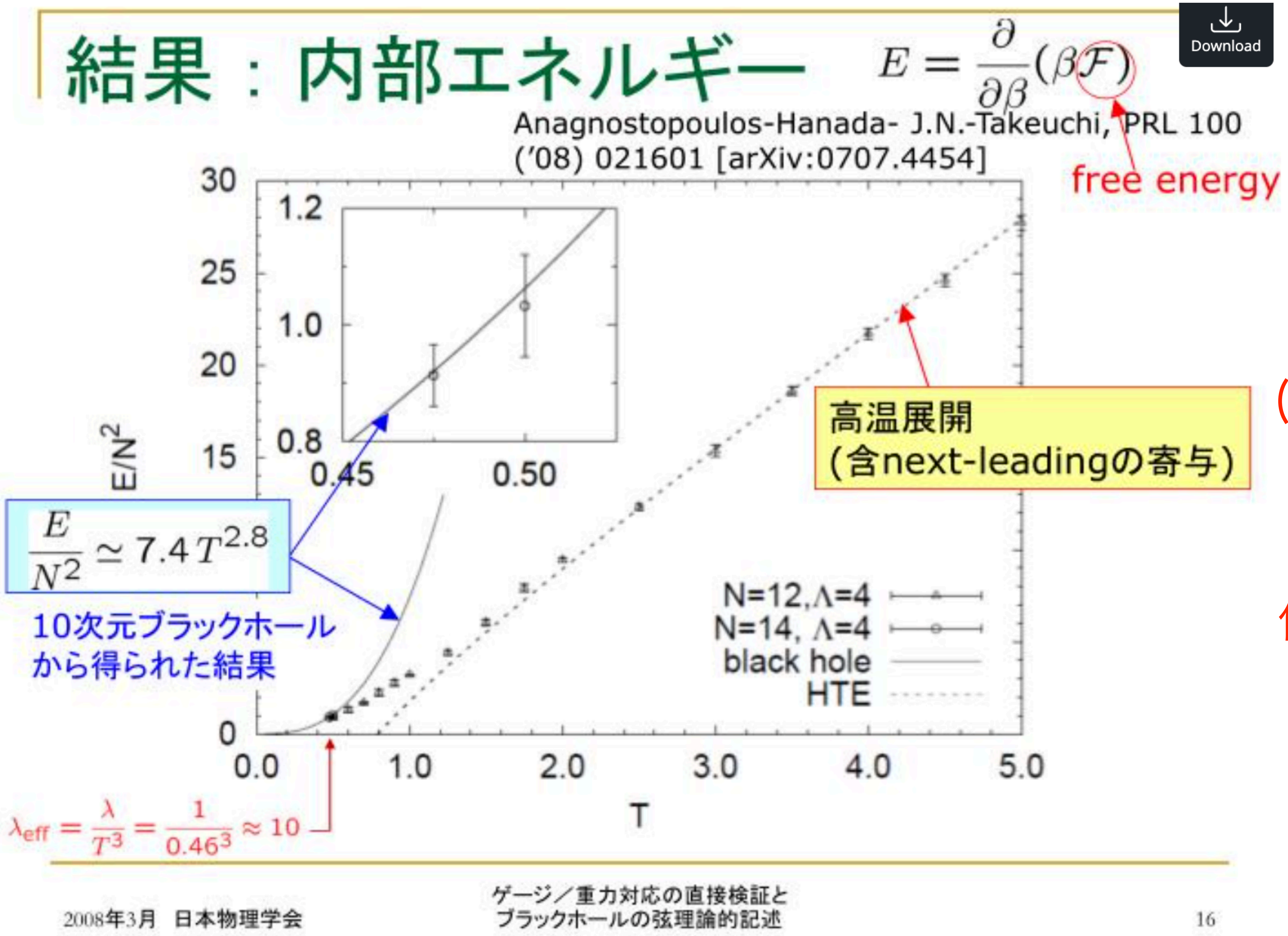
Hirakida, El, Kouno(2018)

- 有限温度相転移した時の熱力学量(trace anomaly, e-3p)をSU(N)ゲージ理論(pure YM)について調べた

- グルオンの自由度で規格化しておくと
  $N \geq 3$ では2%くらいで一致！！
  N依存性が無いということはN=3は既にlarge-N?

- $N \geq 3$の時はZ_N中心対称性の相転移は
  1次相転移
  $N = 2$の時はZ_2中心対称性で，２次相転移
  (critical Isingのユニバーサリティクラス)

(14) ゲージ重力対応の第一原理計算

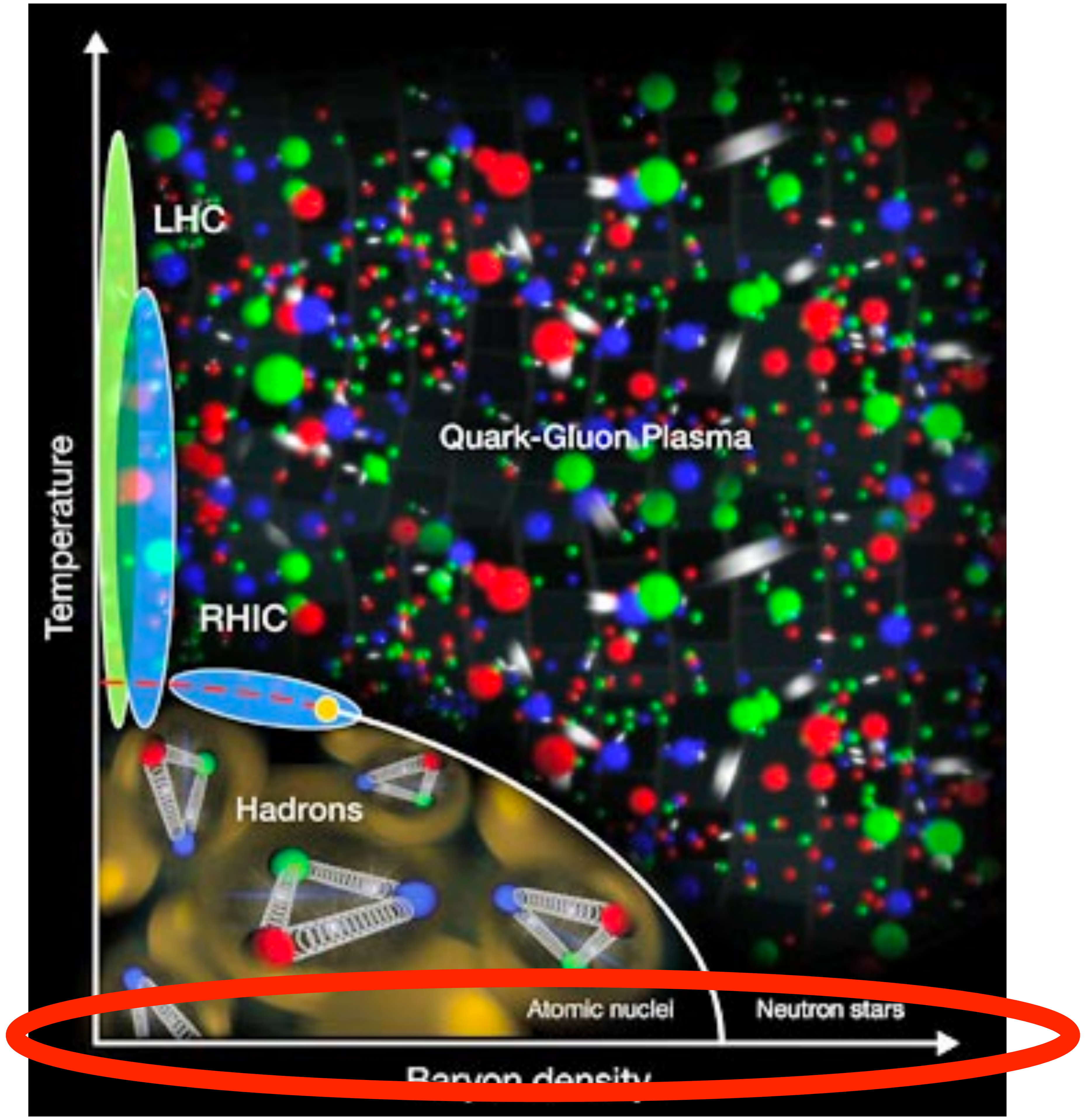


10次元 U(N)ゲージ理論
(を１次元にreductionした模型)の数値計算

高温(弱結合)が高温展開と一致
低温(強結合)が重力理論(10次元BH)と一致

2008年物理学会スライド
西村さん(KEK)
cf.) 加堂氏らも

(15) QCD型超流動と中性子星の物理



- 有限密度QCD

$$\mathscr{L} = -\frac{1}{4}F^a_{\mu\nu}F^a_{\mu\nu} + \bar{\psi}(i\gamma_\mu D_\mu + m)\psi + \mu\bar{\psi}\gamma_0\psi$$

作用が複素数になる (符号問題)

- $D^\dagger = \gamma_5 D \gamma_5$が破れる

$$\Delta(\mu)^\dagger = \gamma_5 \Delta(-\mu)\gamma_5$$

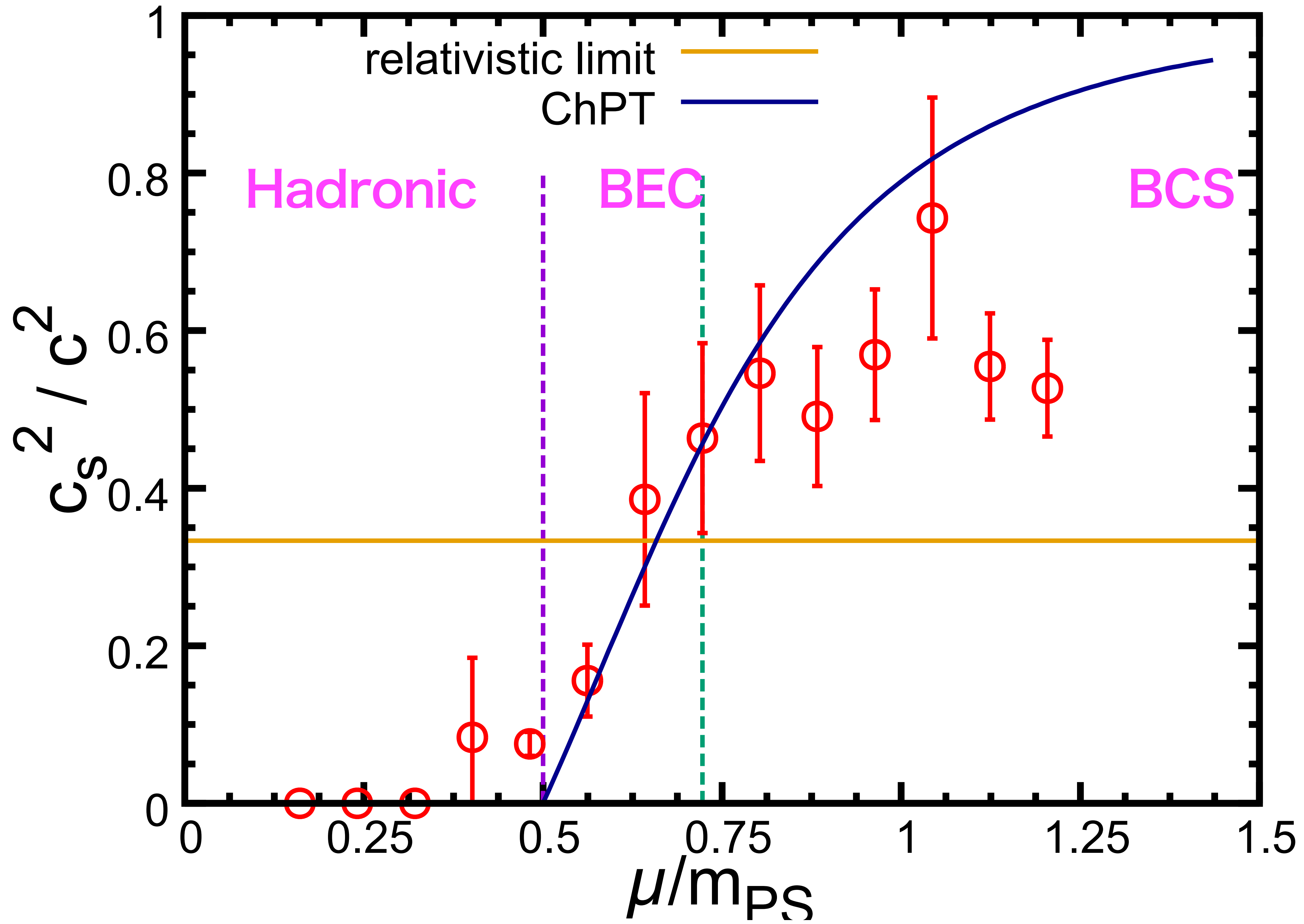
- u-quarkに μ, d-quarkに$-\mu$ をアサインすると

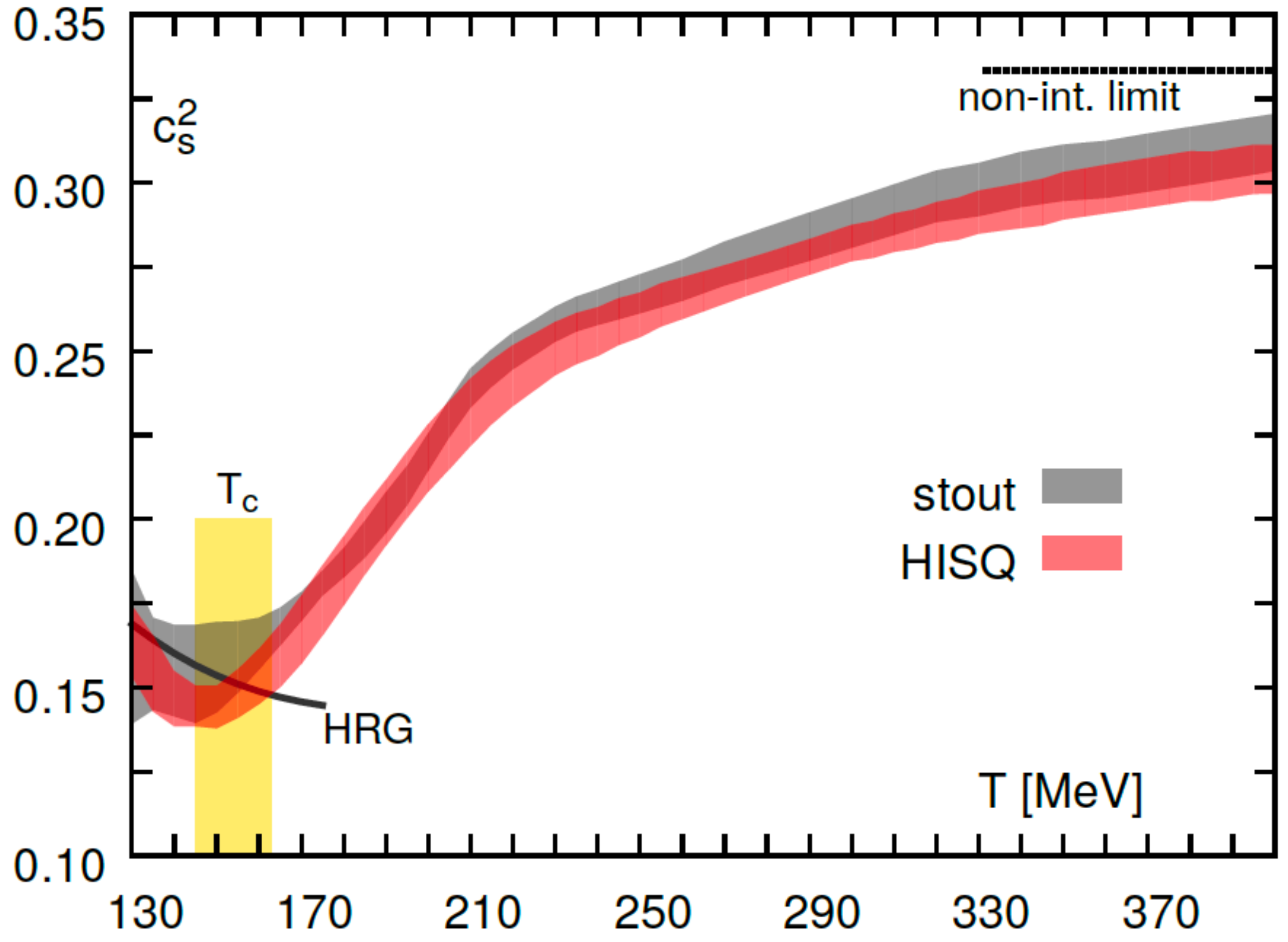
符号問題なし(iso-spin chemical)

- ２カラーQCDはクォークが擬実表現になり偶数フレーバーだと符号問題なし

(15) QCD型超流動と中性子星の物理

K.Iida and EI (2022)





有限温度の時は常に
1/3より小さい

HotQCD (2014)

- 低温高密度ではパイオン凝縮・ダイクォーク凝縮($\langle qq \rangle \neq 0$)が起こり、超流動になる？

  QCDを基礎理論である超流動！

  cf.)普通の超流動：低密度BCS, 高密度BEC

  QCD超流動： 低密度BEC, 高密度BCS

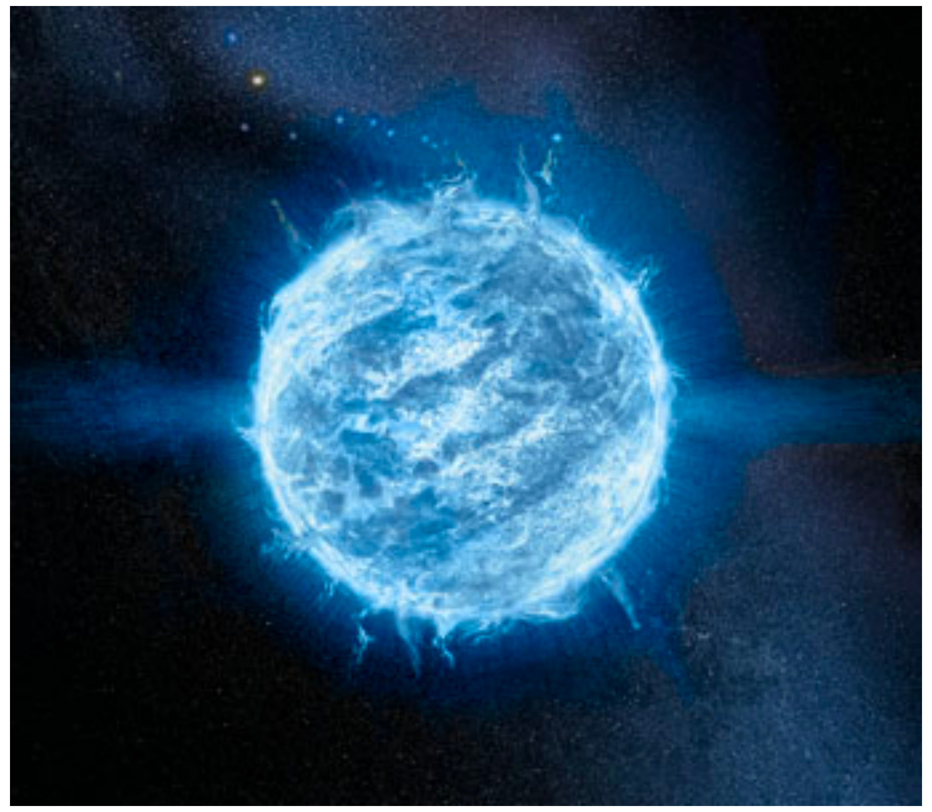
- 低温・高密度では状態方程式が今まで知られていなかった振る舞いをする

  $c_s^2/c^2 > 1/3$

  (相対論的自由場の値を超える)

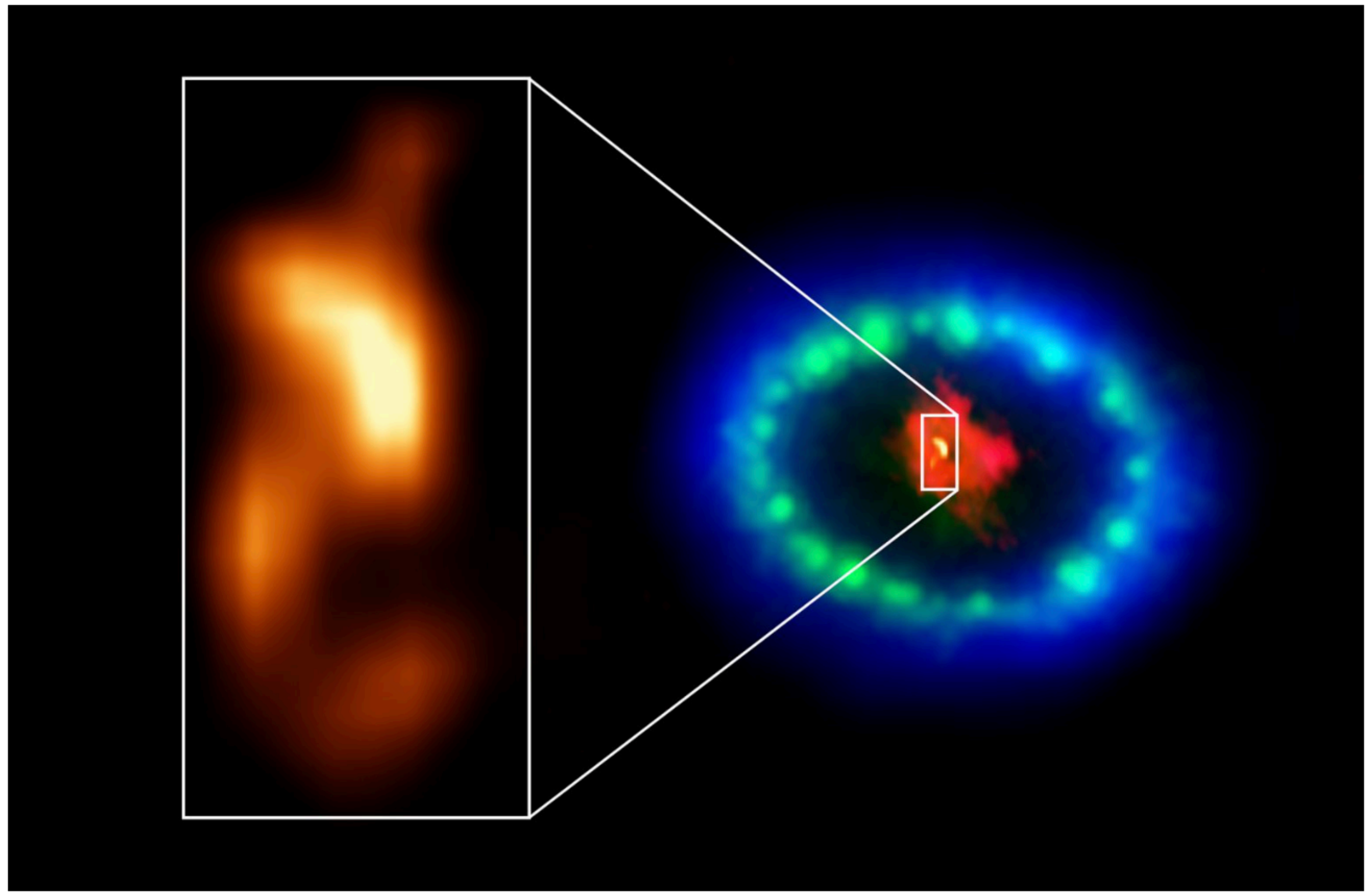
5. 従来法における最大の問題
符号問題

HMCでは解けない物理系



重くて小さい星中性子星
太陽の質量くらい, 半径10km

超新星1987Aの爆発の後に
できてるはず？



アルマ望遠鏡による超高解像度観測で発見された、周囲より温度の高い塵のあつまり（左）。右図の赤色は、アルマ望遠鏡が電波で捉えた冷たいガスと塵の分布。緑色はハッブル宇宙望遠鏡が撮影した可視光、青色はチャンドラX線望遠鏡が捉えたX線の広がりを示していて、リング状の構造は、超新星爆発によって生じた衝撃波が宇宙空間を進み、周囲の物質と衝突しながら広がっているようすを示しています。
Credit: ALMA (ESO/NAOJ/NRAO), P. Cigan and R. Indebetouw; NRAO/AUI/NSF, B. Saxton; NASA/ESA

国立天文台
アルマ望遠鏡
WebPageより

- HMCではできないけど計算したい理論
  - ・実時間発展
  - ・中性子星の中(有限密度QCD)
- 重点サンプリング法

物理量の計算: $\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z}\int D\phi \mathcal{O} e^{-S[\phi]}$

$e^{-S[\phi]}$(理論の情報)を確率の重みとする
ここが負になったり複素数になったり

- 符号問題はNP困難だと証明される
(Troyer and Wiese: Phys. Rev. Lett. 94, 170201, 2005年)
- 重点サンプリング法に代わる計算法？

符号問題に対する様々な取り組み

直接的アプローチ

- 複素ランジュバン法 (KEK)
- Lefschetz thimble法(東大、京大理)
- テンソルネットワーク(テンソル繰り込み群)
(ラグランジアン形式, 筑波大、金沢大、理研神戸)
- 量子計算・テンソルネットワーク法
(ハミルトニアン形式、京大基研、理研ithems, 東大)

永田桂太郎「有限密度格子QCDと符号問題研究の現状と課題」
英語版 arXiv: 2108.12423

符号問題は避け
変形した理論+厳密アルゴリズムで
定性的理解を得る

- 2color QCD
- Isospin chemical potential

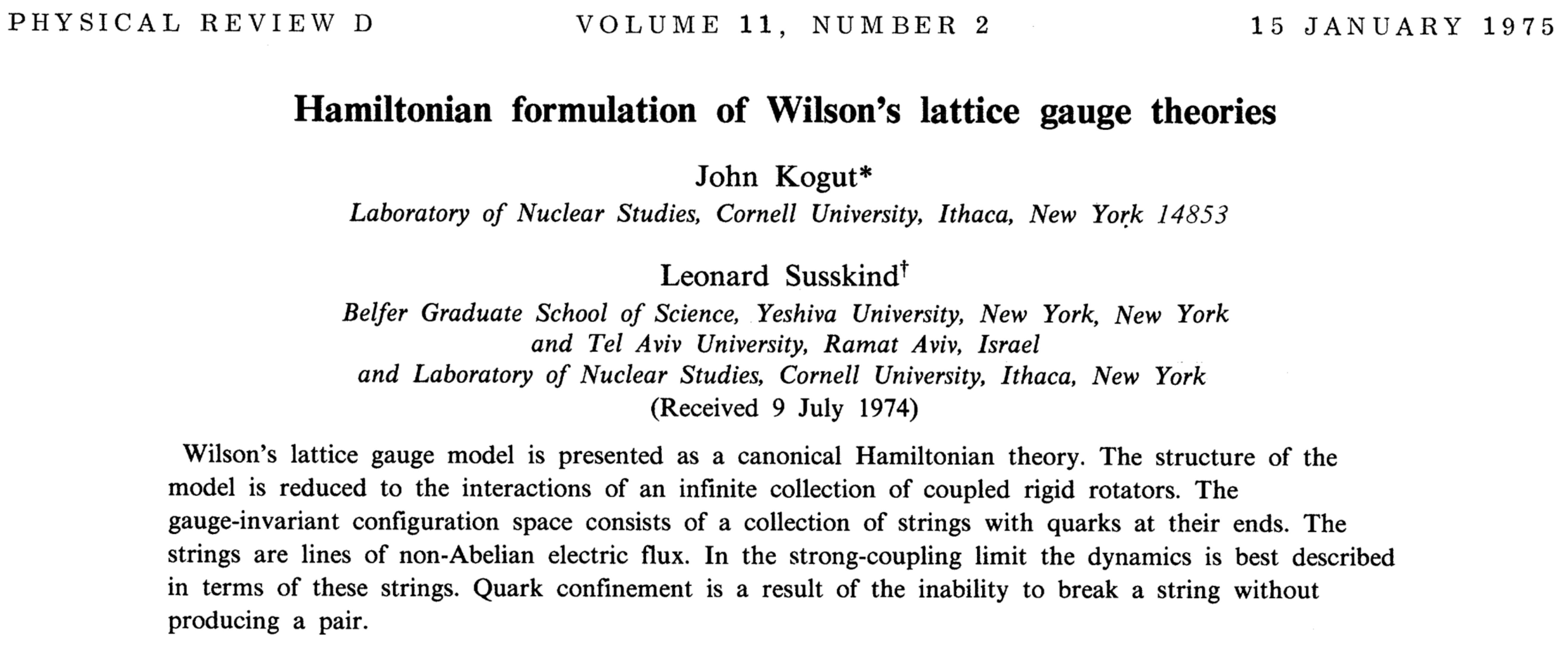
$\mu \ll 1$ 領域で近似する
(高温・低密度には有効)

- Taylor expansion of μ/T
- Reweighting from zero μ to non-zero μ
- Analytic continuation from imaginary chemical potential

Lagrangian vs Hamiltonian ?

- Lattice regularization of gauge theory by K.Wilson (1974)

- Hamiltonian formulation by J.Kogut and L.Susskind (1975)



PHYSICAL REVIEW D VOLUME 11, NUMBER 2 15 JANUARY 1975

Hamiltonian formulation of Wilson's lattice gauge theories

John Kogut*
Laboratory of Nuclear Studies, Cornell University, Ithaca, New York 14853

Leonard Susskind†
Belfer Graduate School of Science, Yeshiva University, New York, New York and Tel Aviv University, Ramat Aviv, Israel and Laboratory of Nuclear Studies, Cornell University, Ithaca, New York

(Received 9 July 1974)

Wilson's lattice gauge model is presented as a canonical Hamiltonian theory. The structure of the model is reduced to the interactions of an infinite collection of coupled rigid rotators. The gauge-invariant configuration space consists of a collection of strings with quarks at their ends. The strings are lines of non-Abelian electric flux. In the strong-coupling limit the dynamics is best described in terms of these strings. Quark confinement is a result of the inability to break a string without producing a pair.

6. 量子計算について

多分時間ないので…

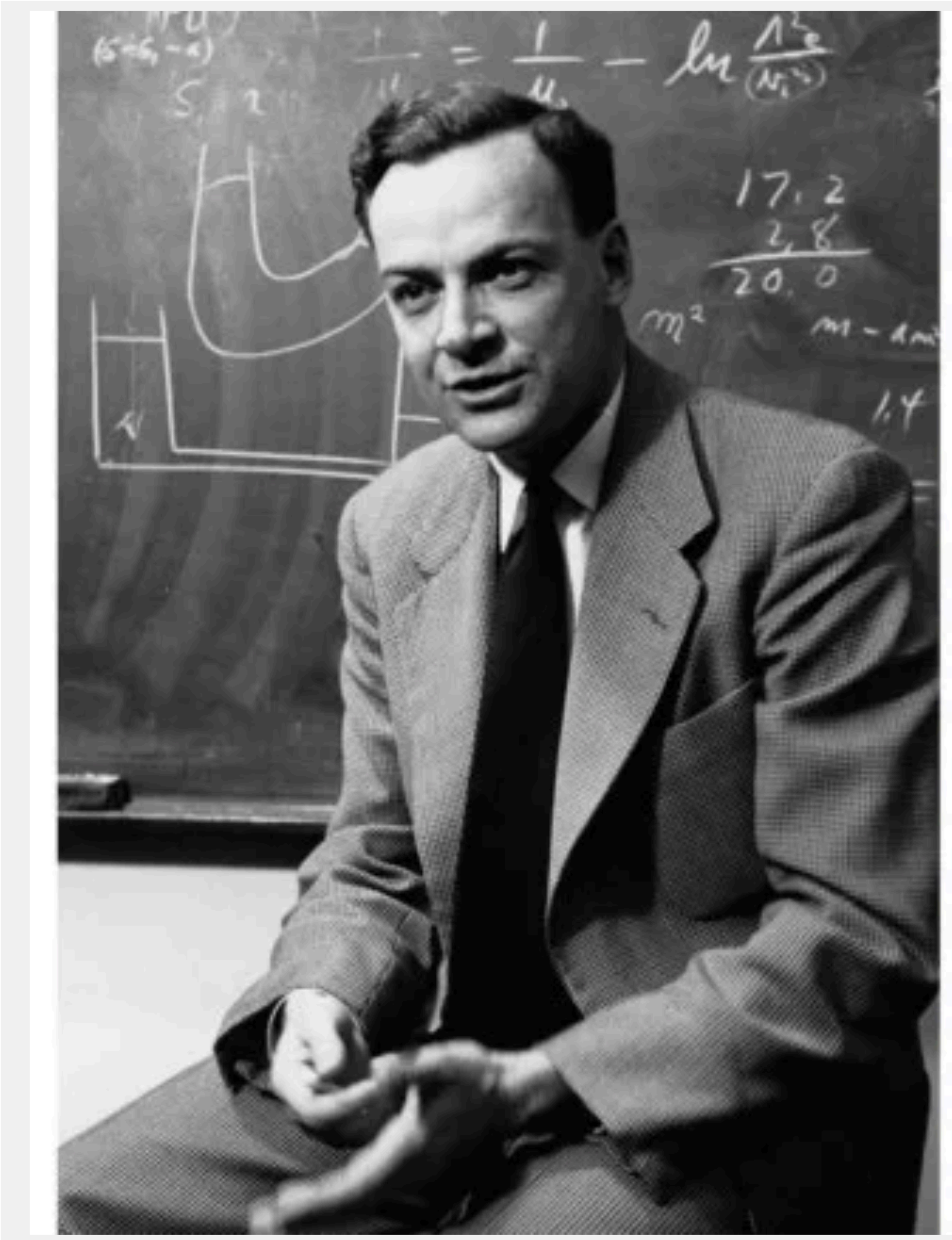
- 3月18日午後　日本物理学会@オンライン
  素粒子論領域，理論核物理領域，領域1，領域11合同シンポジウム
  「テンソルネットワーク法の進展とさらなる可能性」にて

  「場の理論のハミルトニアン形式とテンソルネットワーク法」というタイトルで話します！(TNだけど動機は量子計算にあり)

- 10月14日 - 11月15日　京大基礎物理学研究所
  HHIQCD2024という滞在型研究会 WebSiteこちら
  5週目にゲージ理論の量子計算関連のフォーカスウィーク
  (滞在費補助あり, 多いと先着順, 4月になったらSg-l等でアナウンス)

Nature isn't classical, ...and
if you want to make a simulation of nature,
you'd better make it quantum mechanical, and
golly it's a wonderful problem
because it doesn't look so easy.

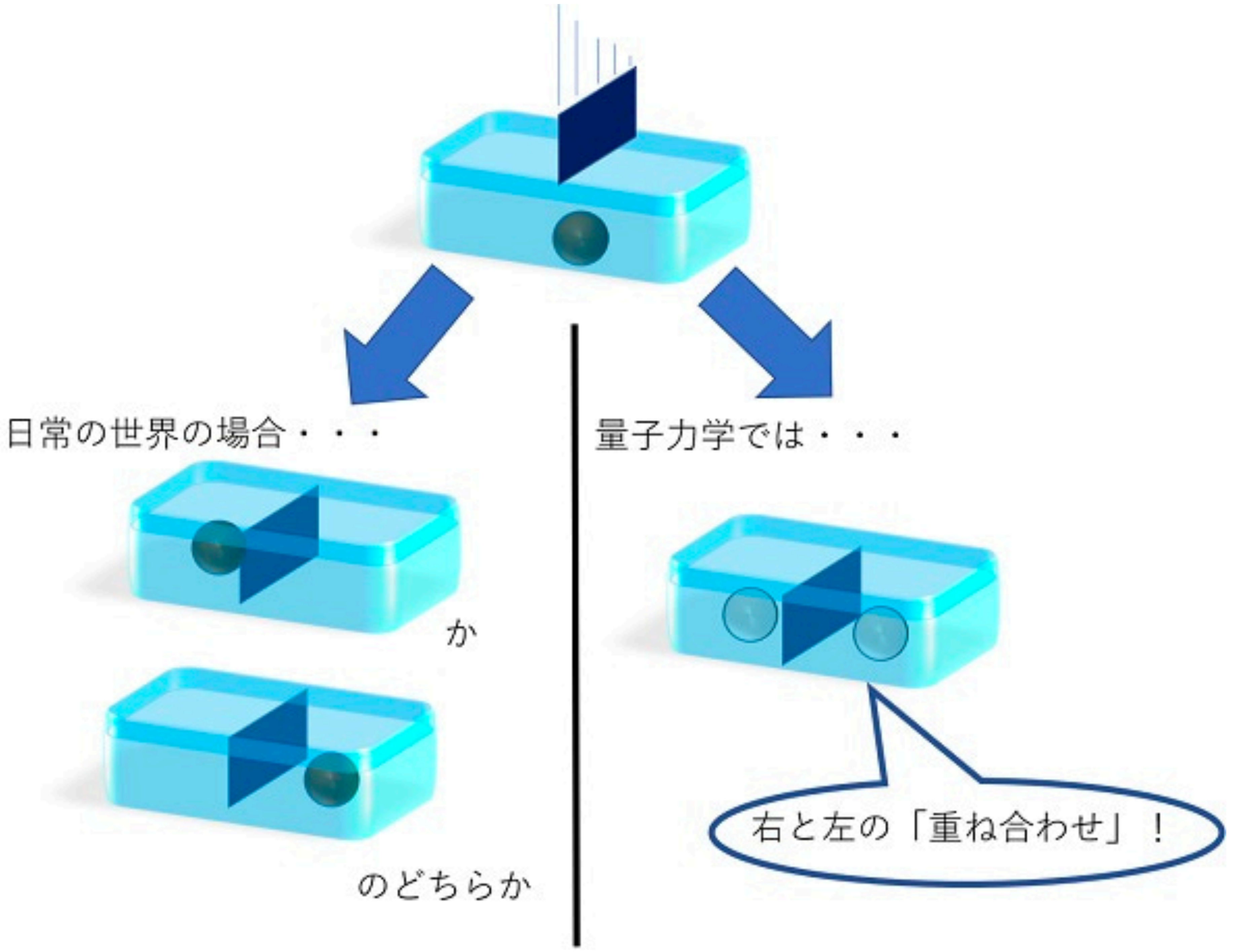
自然は古典的ではないので....自然をシミュレーションしたければ、量子力学の原理でコンピュータを作らなくてはならない
(R.Feynman, 1982)



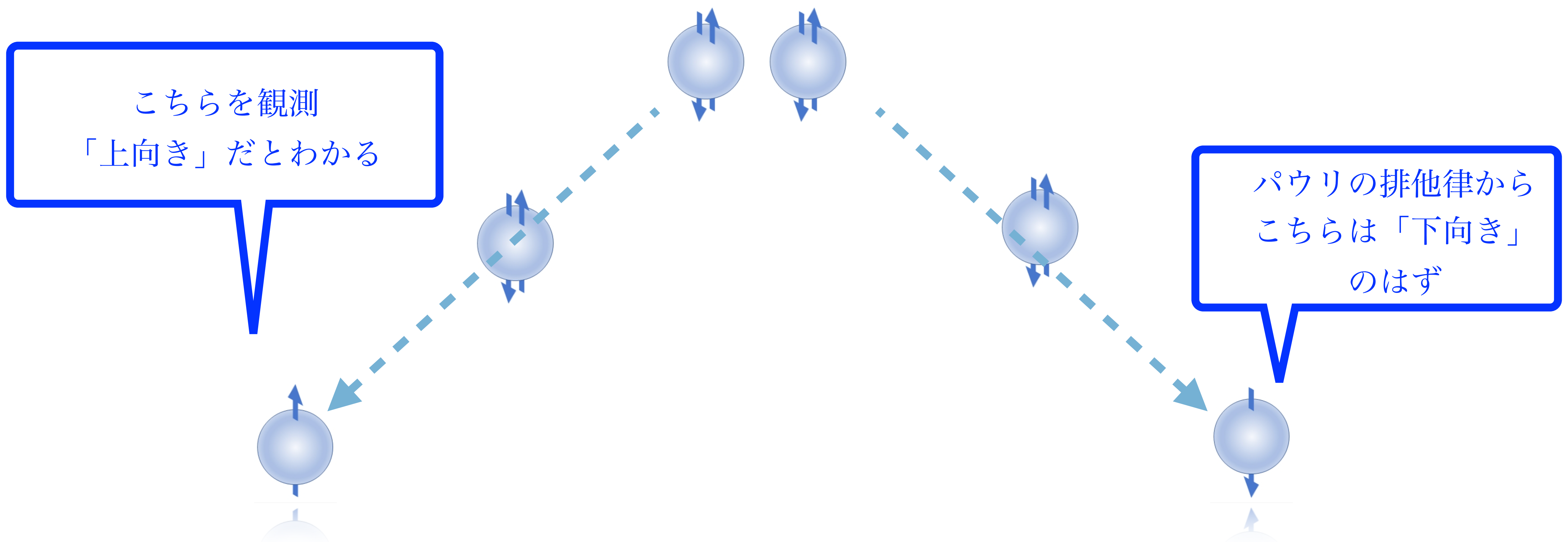
量子コンピュータとは？

- 量子力学の「重ね合わせの原理」「量子もつれ(エンタングルメント)」を用いたハードウェア

重ね合わせの原理



量子もつれ



量子コンピュータとは？

- 量子力学の「重ね合わせの原理」「量子もつれ(エンタングルメント)」を用いたハードウェア

古典コンピュータ

- 各ビットに0または1を持ち
  四則演算(足し算・掛け算)
  論理演算(AND・OR・NOT)
  データをコピーしたり置換したり
  命令を処理することで「計算」する演算装置
- これらの命令やデータを記憶するメモリー装置
- その他、入出力装置、制御装置など

量子コンピュータ

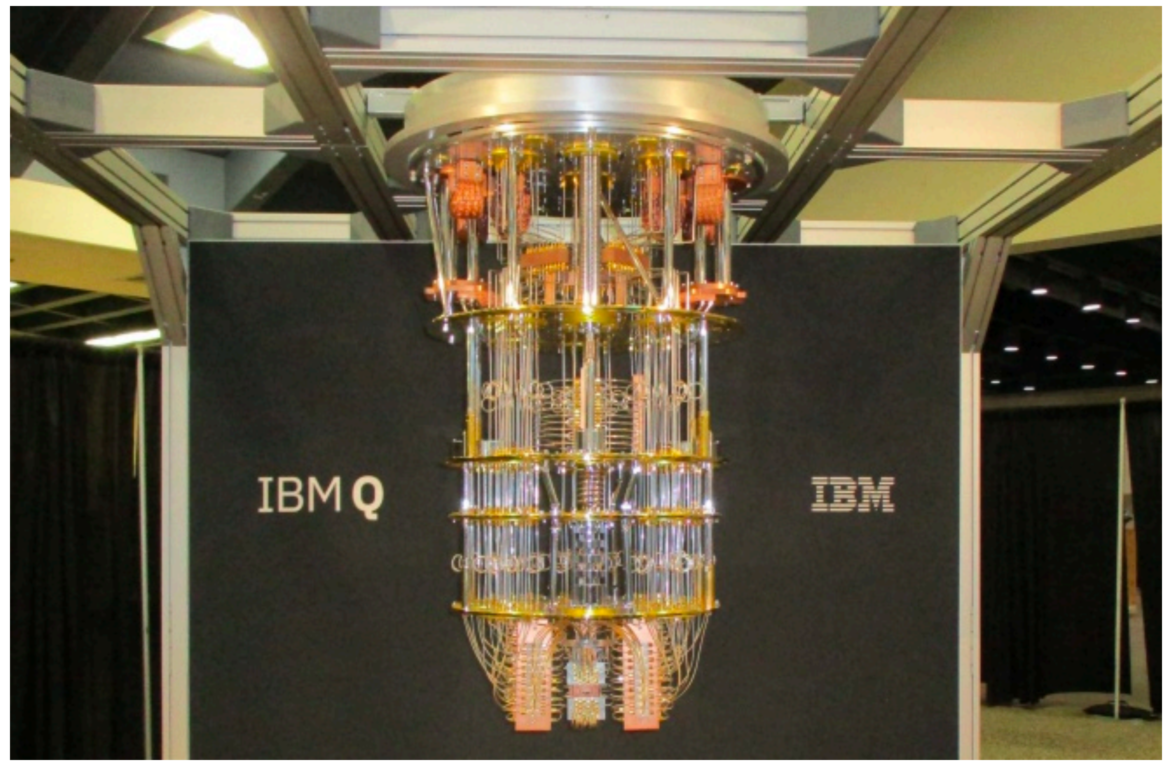
- 各ビットに0と1の重ね合わせ状態を持ち
  ユニタリー行列で記述できる掛け算(に対応する操作)
  0と1の状態の重ね合わせを回転させたり
  NOTゲート(0を1にしたり)
  ２つのqubitの場所を置換したり
  制御ゲート(隣のqubitの様子をみて自分の状態を変えたり)
- データのコピーができない (No-cloning theorem)

量子コンピュータの種類

- 量子アニーリングマシン
  - D-Wave

- ゲート型量子計算機
  - 超電導素子を使ったもの
    IBM Q, Sycamore (Google), Rigetti
  - イオントラップ型
    Ion Q
  - 光量子型
  - イジングマシン

- 測定型量子計算機
  - 光量子型（？）



期待される優位性

- メモリーの優位性
  量子状態を記述するときに(qu)bitの数Nに対して
  古典コンピュータはNに比例した状態を記述(~$\mathcal{O}(N)$)
  量子コンピュータは2^N次元の状態を記述

1-qubit: $|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} * \\ * \end{pmatrix}$ 2次元ヒルベルト空間を記述

N-qubit: $|\Psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_N\rangle = \begin{pmatrix} * \\ \vdots \\ * \end{pmatrix}$ 2^N次元ヒルベルト空間を記述

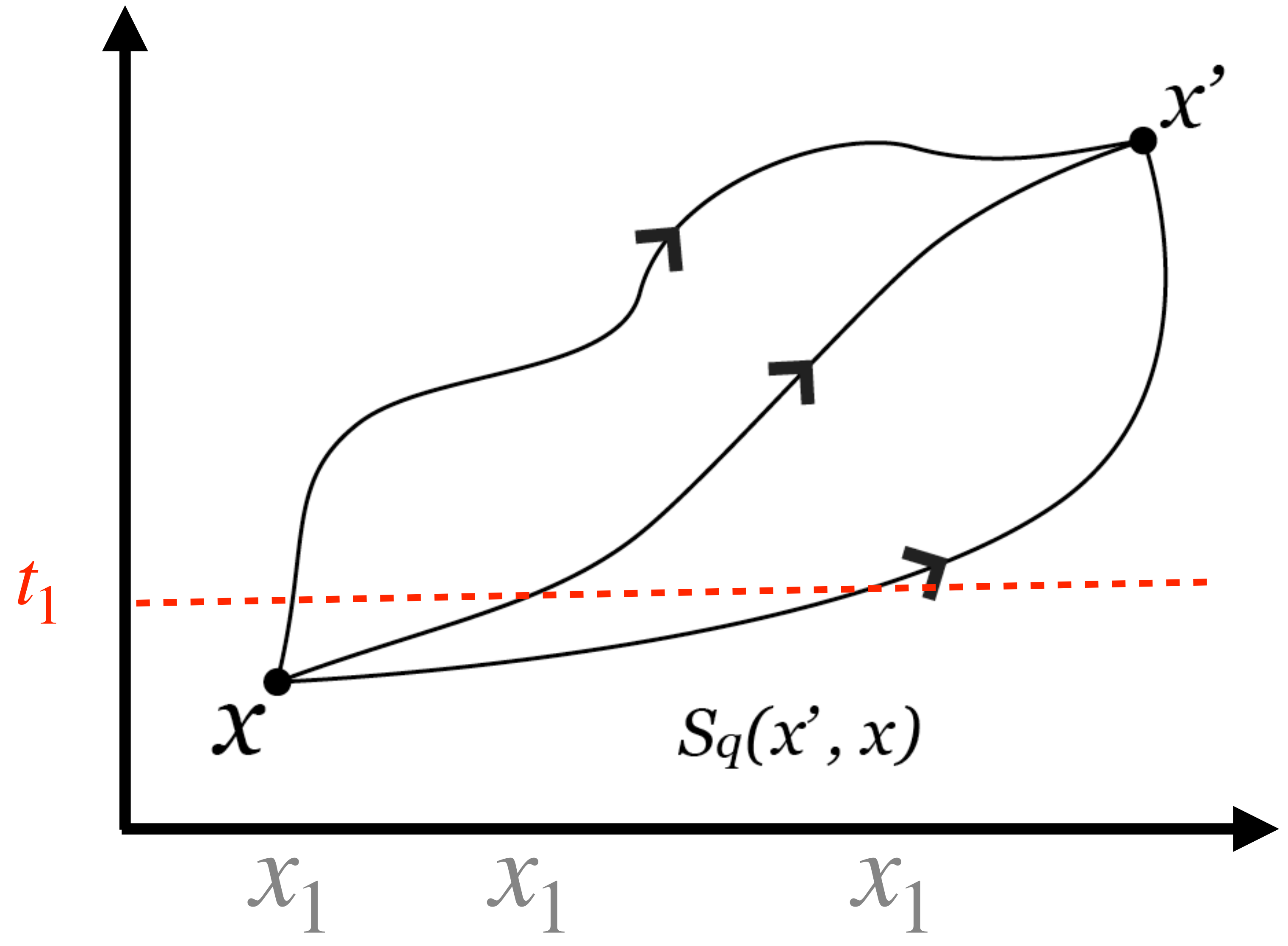
- 負の確率の出現(計算経路の消滅と計算の高速性)
  量子論の経路積分
  不確定性原理より粒子がxからx'へ移動するとき
  可能な全ての経路を(正しい確率で)足し合わせないといけない

- 新しいハードウェアに対応した新しいアルゴリズムを開発
  それを使って今まで難しかった計算ができるようになる
  ex.) 最適化問題、素因数分解など

素粒子論での新しい計算法

- 古典計算機では,計算を高速化するために理論の情報(作用)を重みとしてモンテカルロ法
(重点サンプリング法) $\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z}\int Dx\mathcal{O}e^{-S_q(x,x')}$

- 量子計算機では,時間発展で粒子が通る
経路を足し合わせていけるのではないか？
(同じことを古典計算機でしようとすると
メモリーの問題, 計算速度の問題があった)



$$\langle x'(t)|x(0)\rangle = \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N \langle x'|e^{-iH\Delta t}|x_N\rangle \cdots \langle x_2|e^{-iH\Delta t}|x_1\rangle\langle x_1|e^{-iH\Delta t}|x\rangle$$

量子コンピュータ全体の課題

- サイズが小さい

  サイズ(qubit)の数は

  N ~ 20 -400くらい

- 量子エラーが起こる

  環境からの影響で勝手に反転するなど, 制御操作をするときの誤差

  (反転させようとしてもきちんとならなかったり)

  ゲート演算の正確さは$10^{-2} \sim 10^{-3}$ (100回演算すると1回失敗する)

Moore's law for quantum devices

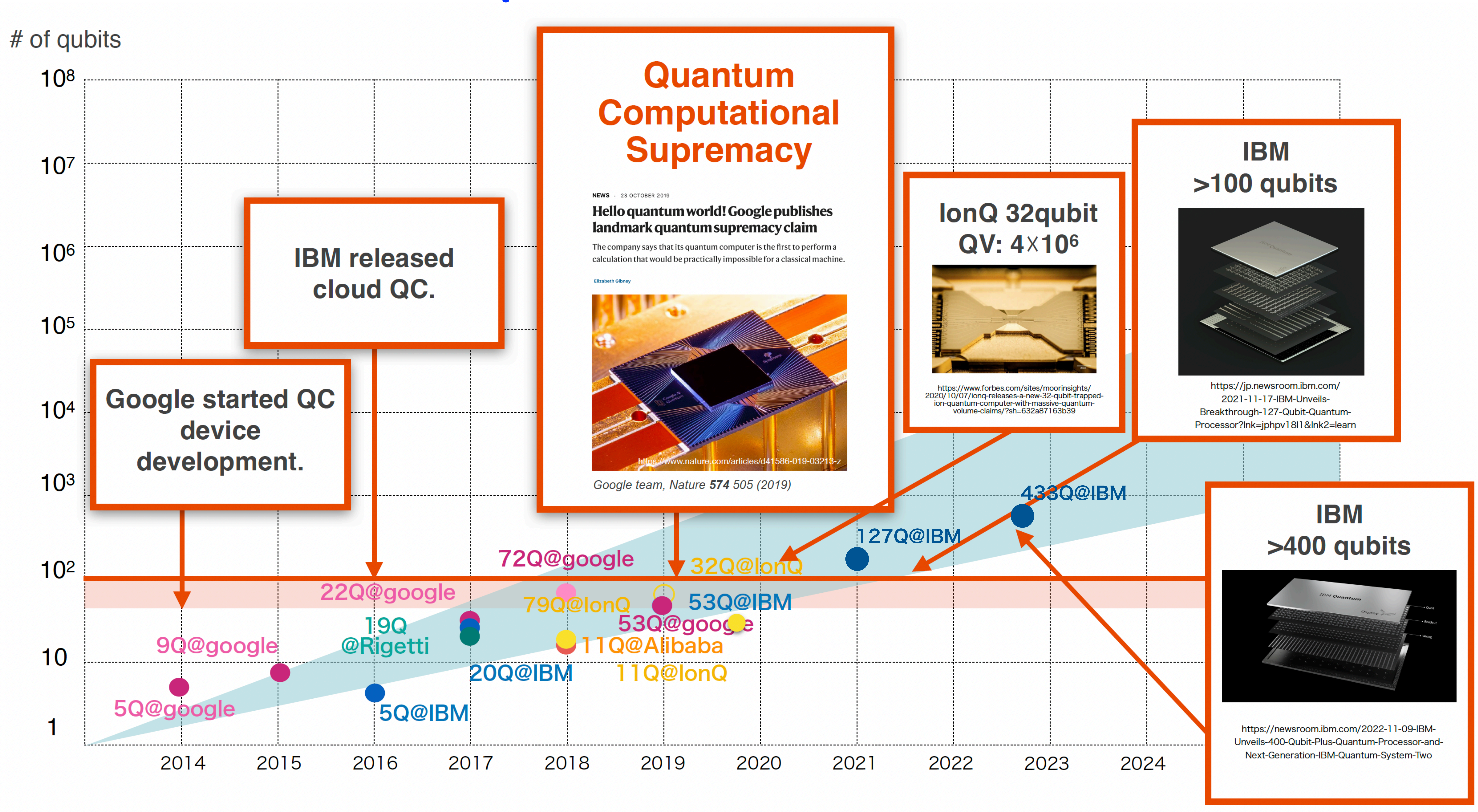
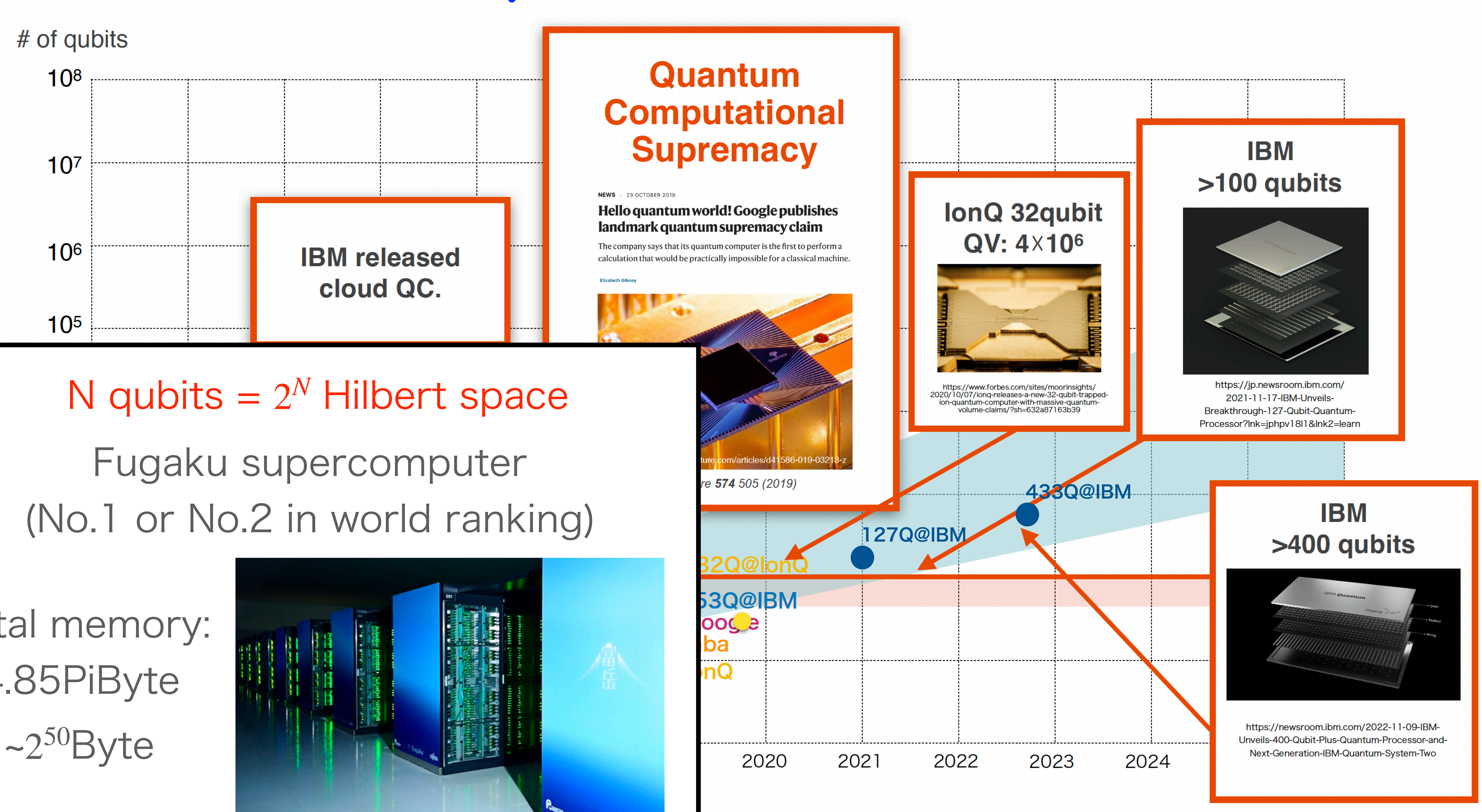


Figure given by Keisuke Fujii @QIQB, Osaka U.

Moore's law for quantum devices



N qubits = 2^N Hilbert space

Fugaku supercomputer
(No.1 or No.2 in world ranking)

Total memory:
4.85PiByte
~2^{50}Byte

Figure given by Keisuke Fujii @QIQB, Osaka U.

今ある量子コンピュータを触ってみよう

- ゲート型マシン
  ・超電導素子を使ったもの
  IBM Q, Sycamore (Google), Rigetti

- 実機は並ぶのでシミュレータを使ってみる
  (コードはほぼ同じものが使える)

- IBM Quantum
  https://quantum-computing.ibm.com/

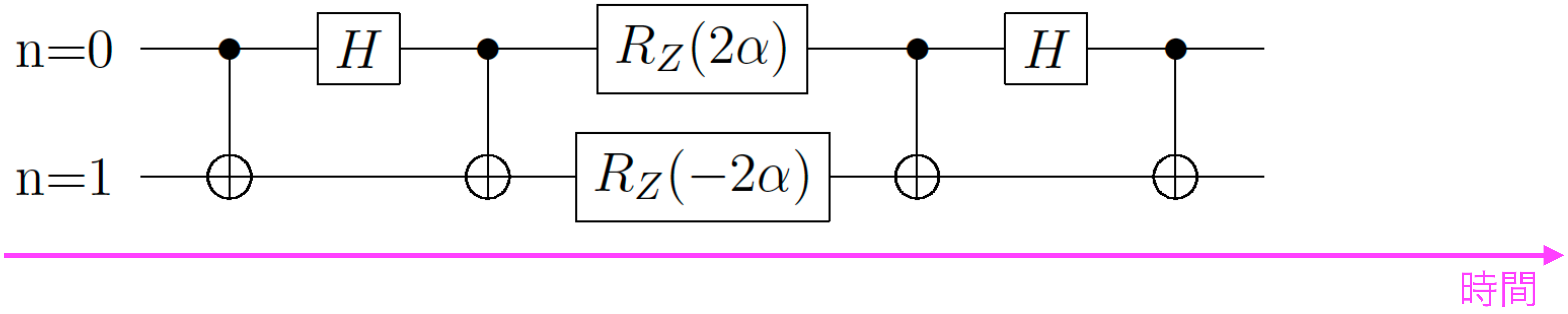
〜お品書き〜
(1)IBM Quantum Composer
(2)IBM QuantumLab
(2-1) シミュレータによる実行
(2-2) 実機による実行

古典コンピュータ

- 各ビットに0または1を持ち
  四則演算(足し算・掛け算)
  論理演算(AND・OR・NOT)
  (結果が「0」なら次はこれ「1」ならこれを実行しろ)
  データをコピーしたり置換したり
  命令を処理することで「計算」する演算装置
- これらの命令やデータを記憶するメモリー装置
- その他、入出力装置、制御装置など

量子計算(ゲート型)の基本的な計算戦略

量子回路(quantum circuit)



横の線はqubitを表す (線の数がqubitの数)

四角や丸がゲート演算を表す

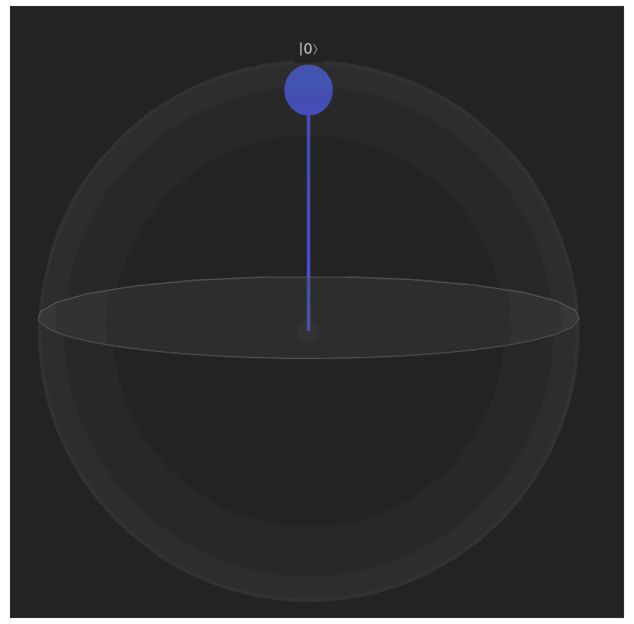
量子コンピュータ(qubit)

- qubit (quantum bit, 2次元ベクトルで書ける)

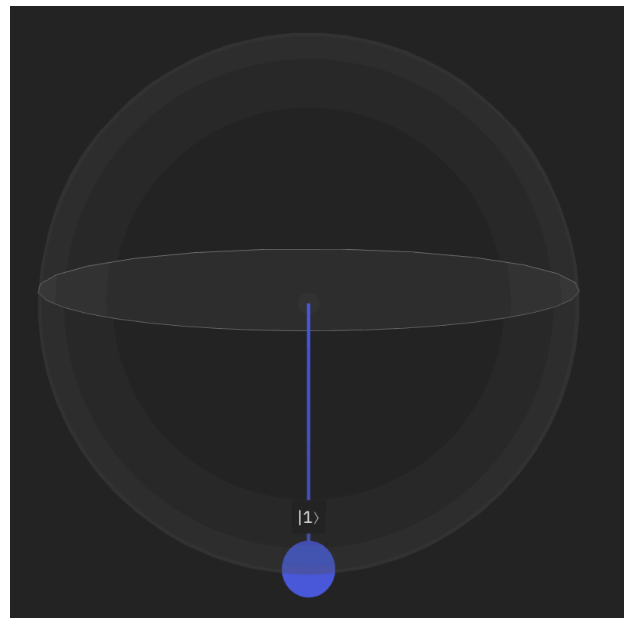
$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \ |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

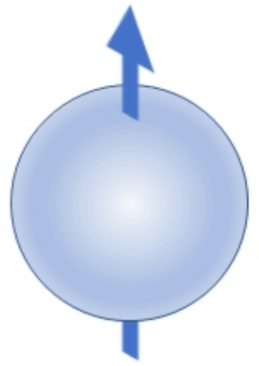
例) 1/2 spin system : $|0\rangle = |\uparrow\rangle, \quad |1\rangle = |\downarrow\rangle$

$|0\rangle$

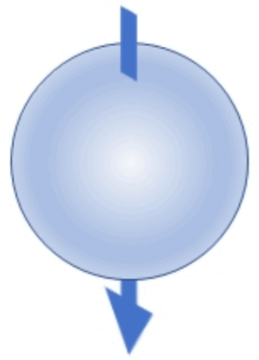


$|1\rangle$





上向きスピン

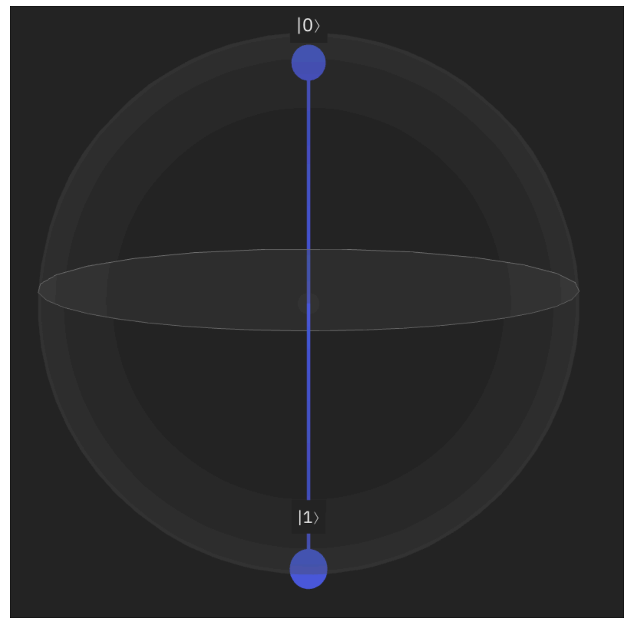


下向きスピン

- 一般的なqubitの状態：
  0と１の重ね合わせ状態

$$\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \ |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$ (α, βは複素数)

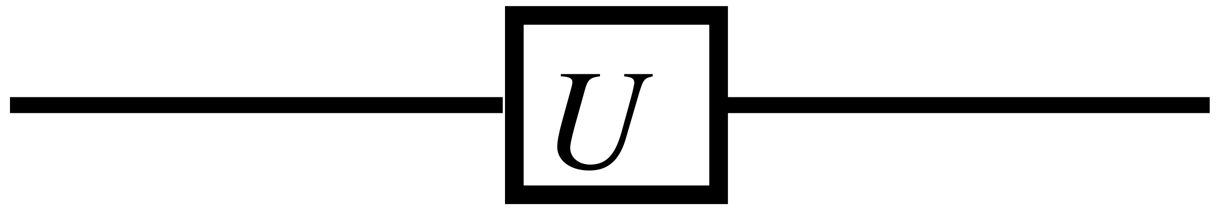
$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$



量子コンピュータ(ゲート演算)

- ユニタリー演算子(行列)を状態(qubit)に掛ける

$|\psi\rangle$:



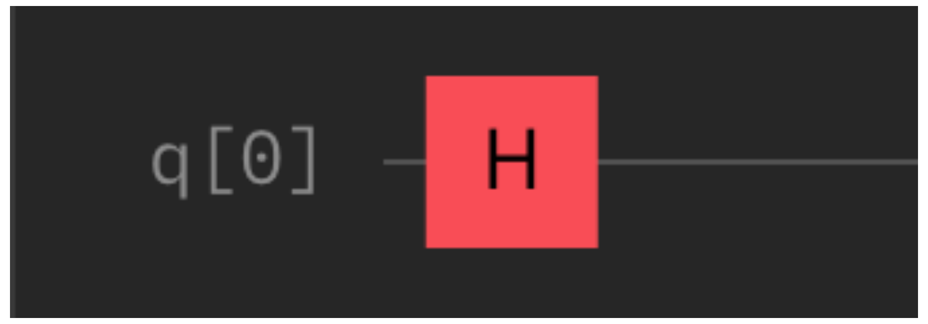
2乗すると単位行列

例) アダマールゲート(H),　$H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$

スピン上向状態に作用させると

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle))$$

$$H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle))$$



X,Y,Zゲート

$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ (NOTゲート)

$Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$

$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

R_X, R_Y, R_Z **ゲート**

$R_X(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}X}$

$R_Y(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}Y}$

$R_Z(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}Z}$

量子コンピュータ(多ゲート演算)

- **2 qubits** : 4次元 ヒルベルト空間:

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j=0,1} C_{ij}|ij\rangle, \quad |ij\rangle \equiv |i\rangle \otimes |j\rangle$$

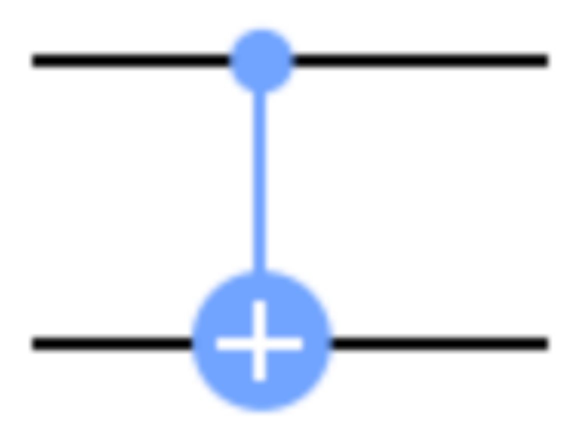
$$|00\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix}, \quad |01\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix}, \quad |10\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix}, \quad |11\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}$$

N qubitsの時は
2^N次元の空間を表せる

- **コントロールド-X:**
１つ目のqubitが1ならば，２つ目のqubitにX-gateを掛ける

$$CX|00\rangle = |00\rangle, \ CX|01\rangle = |01\rangle, \ CX|10\rangle = |11\rangle, \ CX|11\rangle = |10\rangle$$

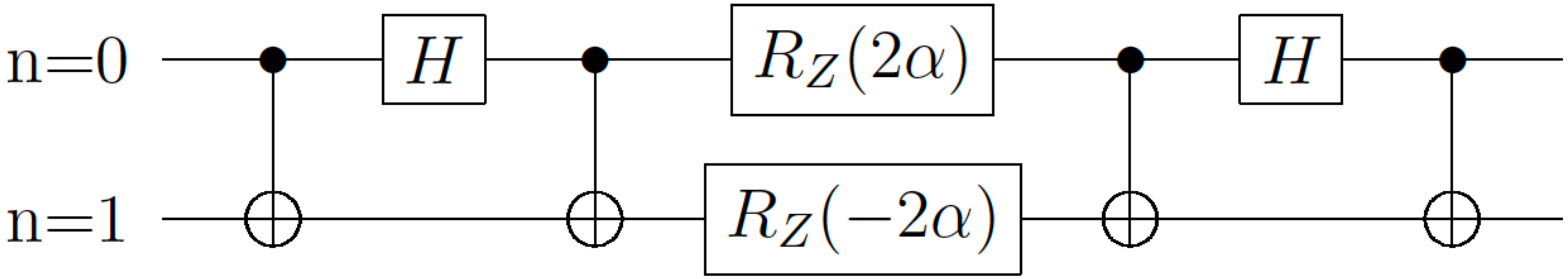
行列表示: $CX = \begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\end{pmatrix}$

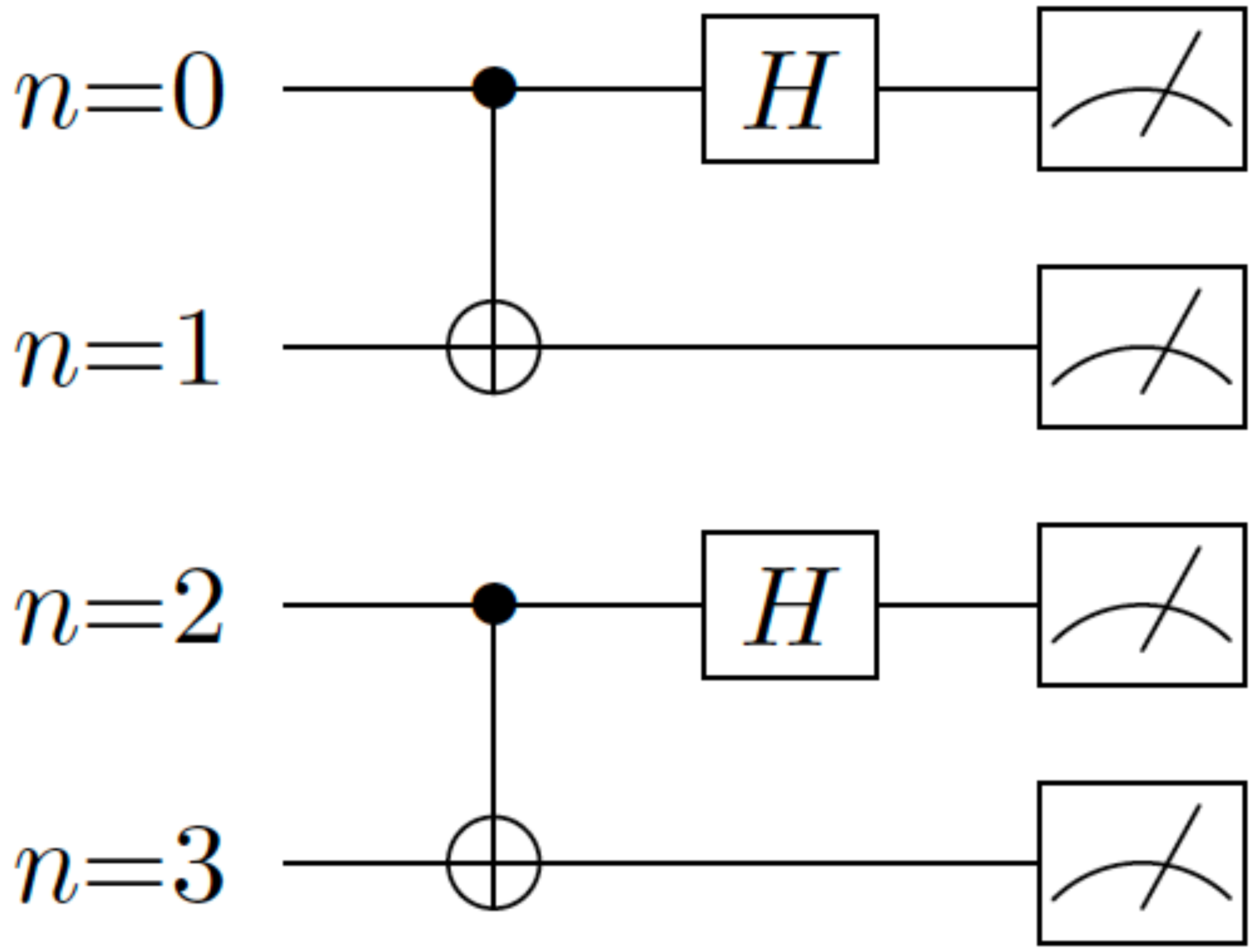


場の理論で相互作用を実装すると
よく使う

量子計算のコード

量子回路(quantum circuit)





観測ゲート(古典ゲート)

観測することでqubitの重ね合わせ状態がなくなって

$|0\rangle$ または $|1\rangle$ の状態が"確率的に"得られる

例）作られたqubitの状態が$\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$だった時

$|0\rangle$が確率$|\alpha|^2$で

$|1\rangle$が確率$|\beta|^2$で得られる

量子計算のコード

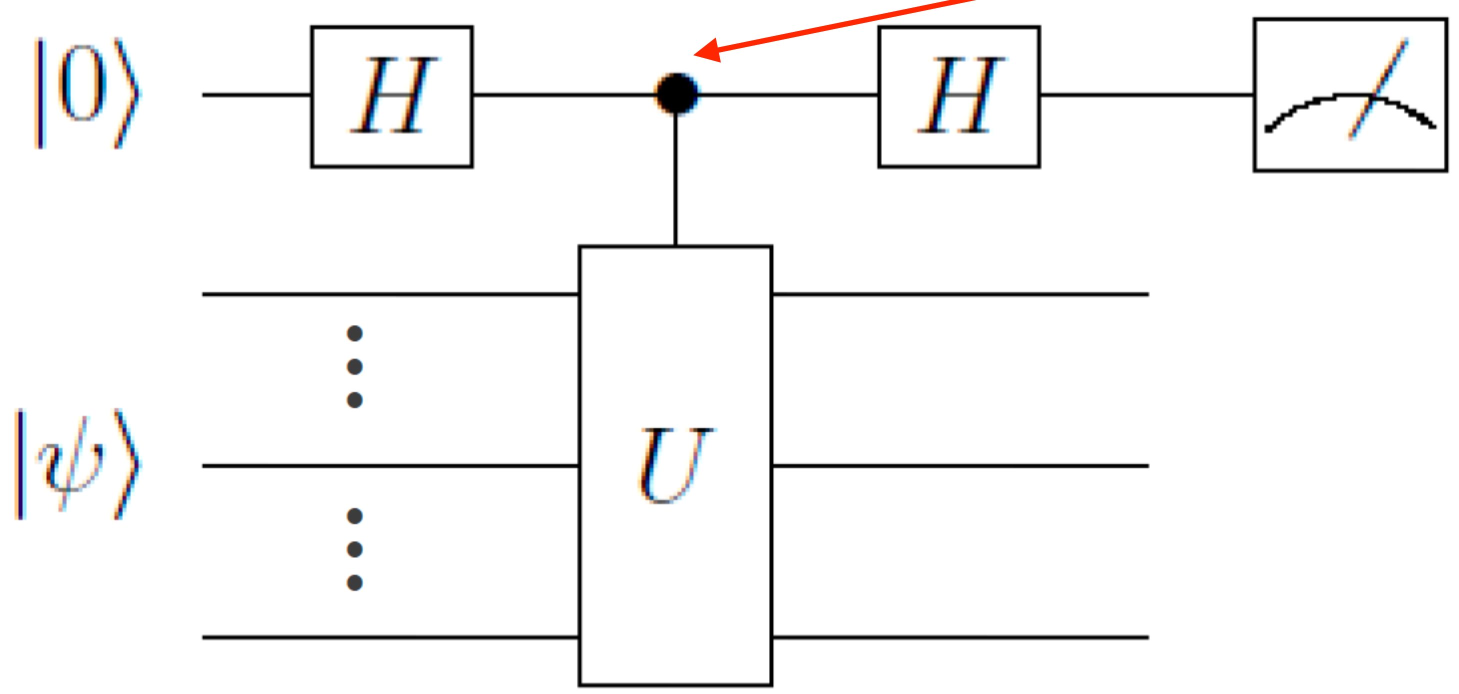
アダマールテスト(エンタングルメントの利用)

あるqubitを観測し、それとエンタングルしているqubitの情報を得ることもできる

アンシェラqubitが$|0\rangle$だったら何もしない

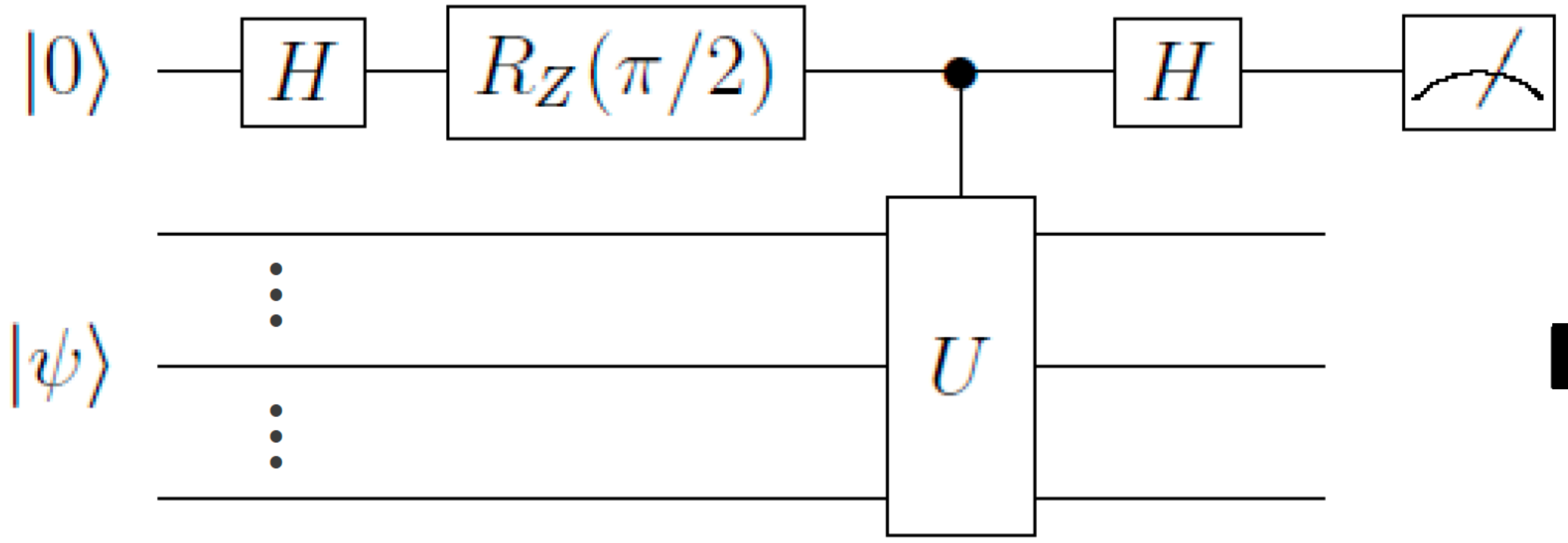
$|1\rangle$だったらUを作用させる

アンシェラqubit



Re ($\langle\psi|U|\psi\rangle$)= $P_{|0\rangle} - P_{|1\rangle}$として求まる

アンシェラqubit



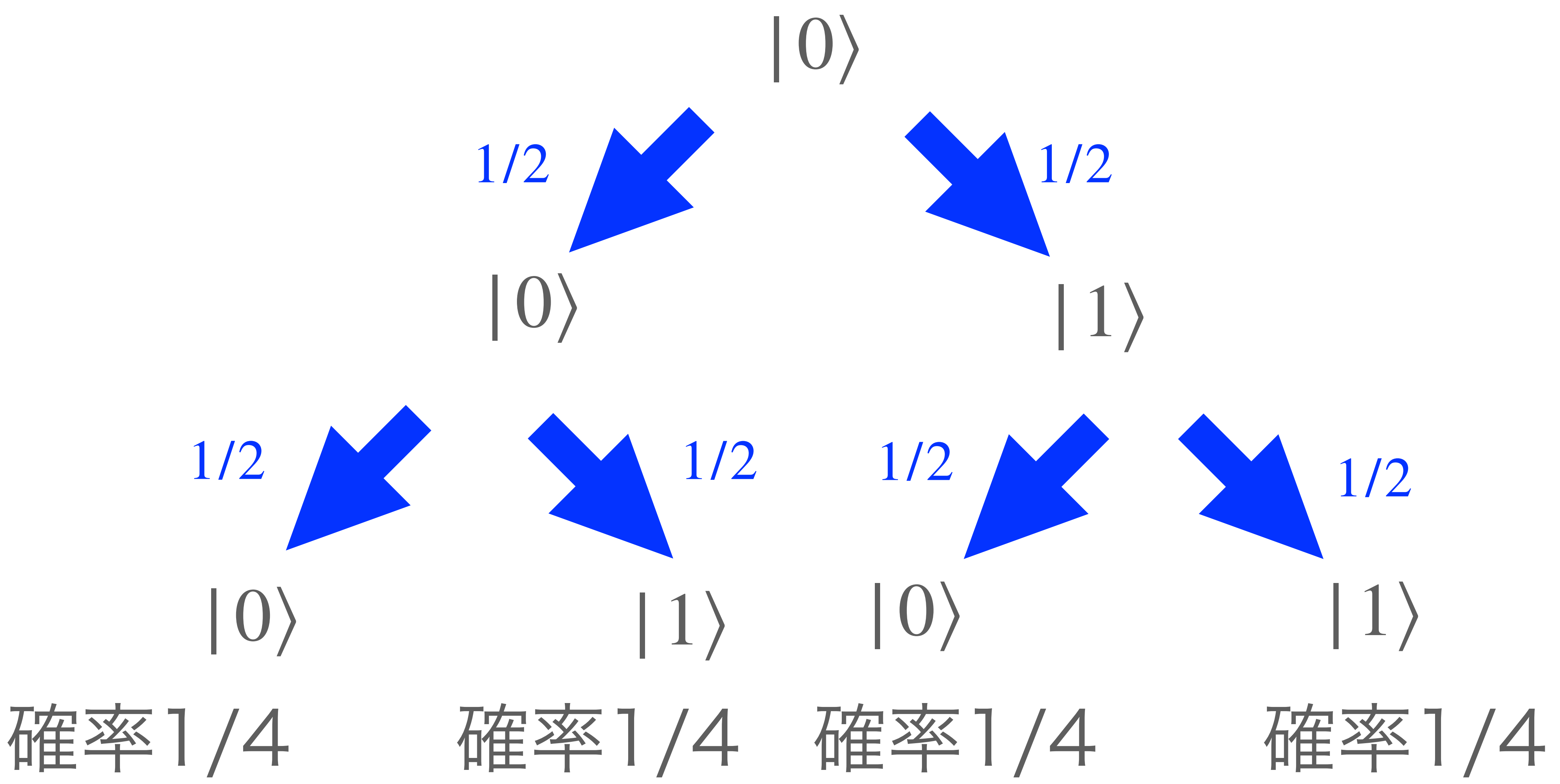
Im ($\langle\psi|U|\psi\rangle$)= $P_{|1\rangle} - P_{|0\rangle}$として求まる

量子計算における計算経路の消滅

古典計算の経路

初期状態で$|0\rangle$

確率1/2でビットを反転する計算を２回する

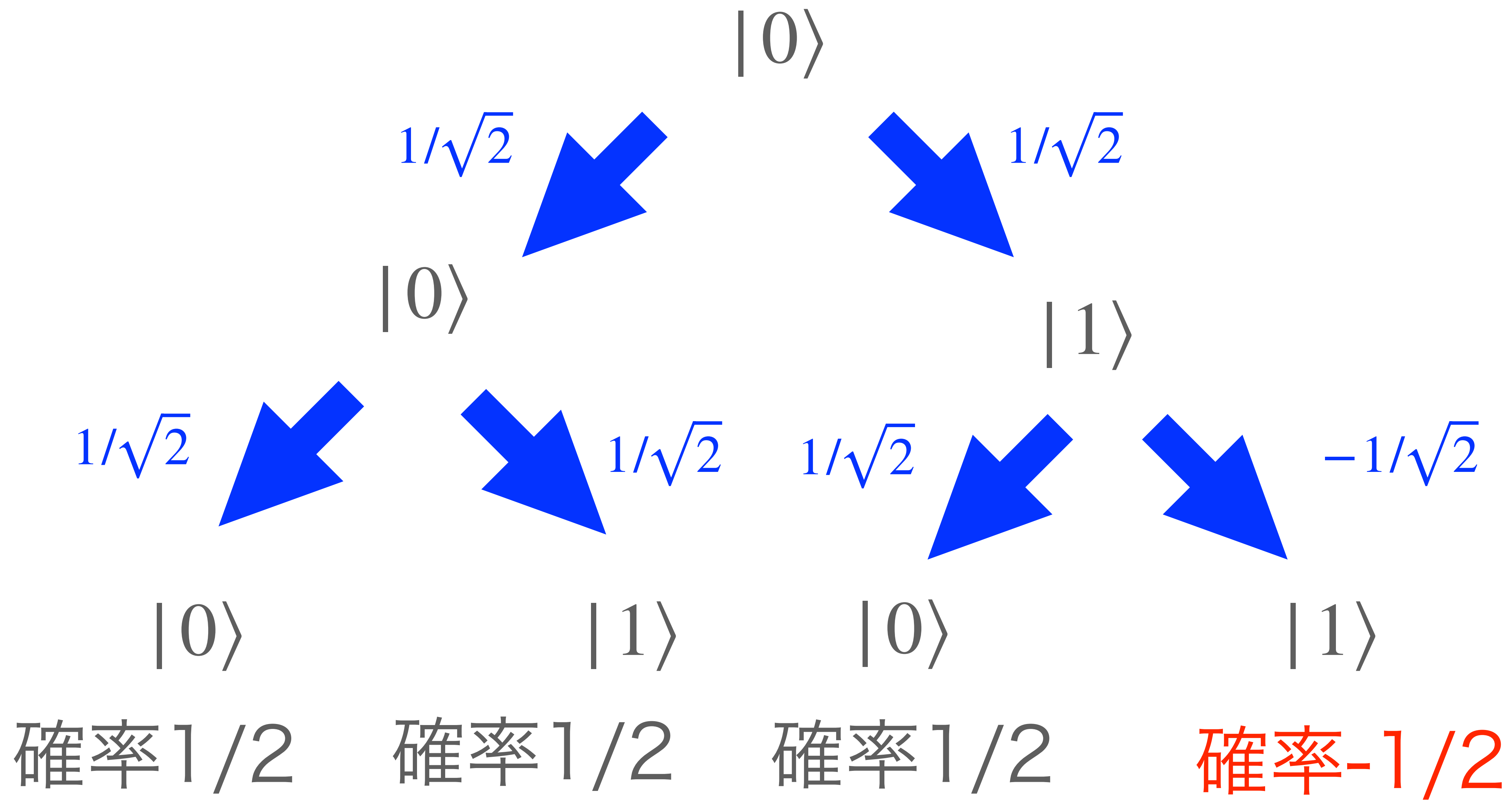


最後には確率1/2で$|0\rangle$, 確率1/2で$|1\rangle$を得る

量子計算の経路

初期状態で$|0\rangle$

アダマールゲート(H-gate)を２回作用させる



最後には確率1で$|0\rangle$

Hを２回作用させた時に$|1\rangle$になる経路は消滅する

(これを古典計算でシミュレートするのは大変)

量子アルゴリズムを使った場の理論の研究

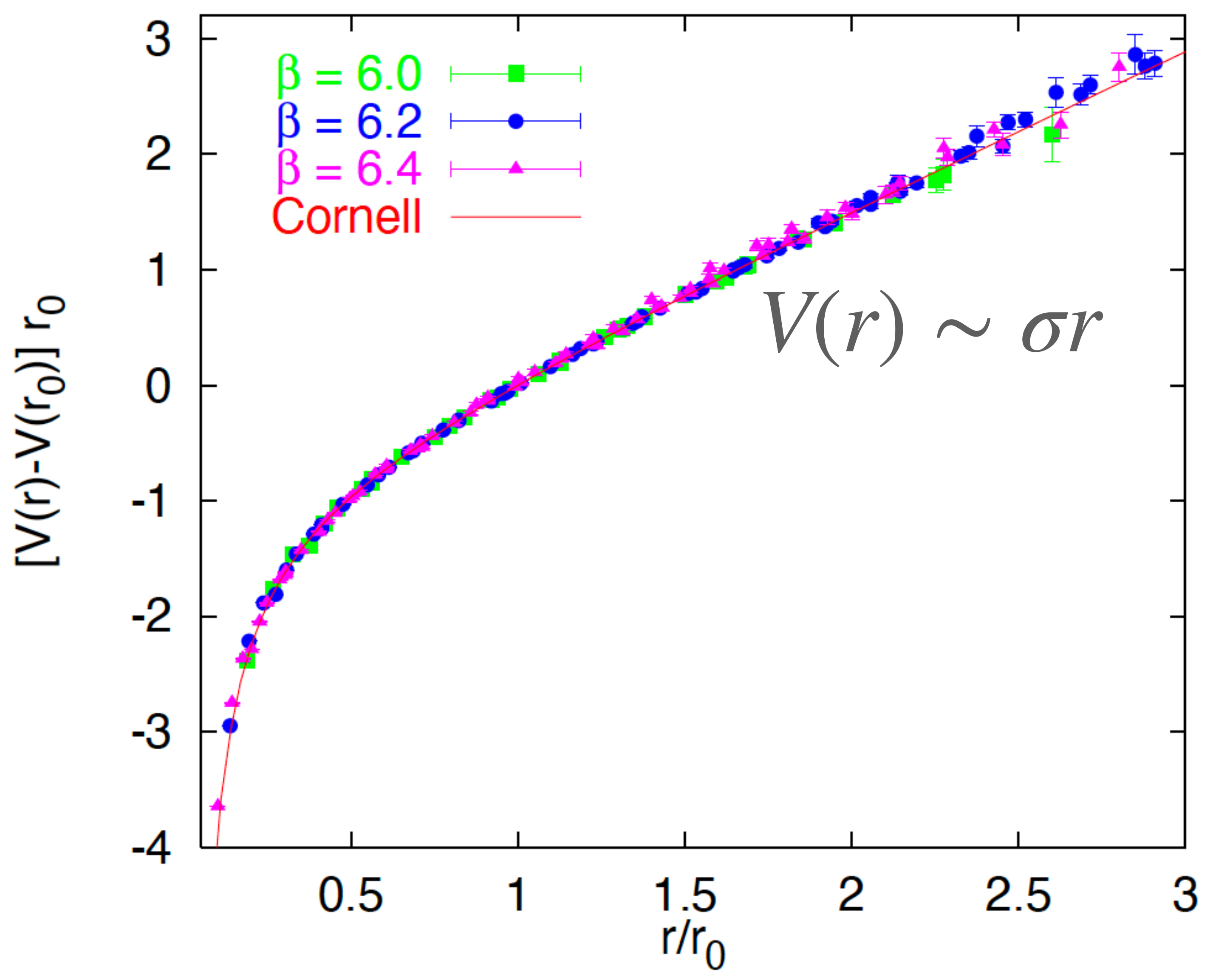
- In Hamiltonian formalism, different calculation method is available

Ex.) $q - \bar{q}$ potential

- Lagrangian formalism: Wilson loop

$$\langle W(C) \rangle \underset{T\to\infty}{\approx} e^{-TV(r)} = \mathrm{tr}\left[\prod_{i\in C} U_i\right]$$

G.Bali, Phys.Rept.343:1 (2000)

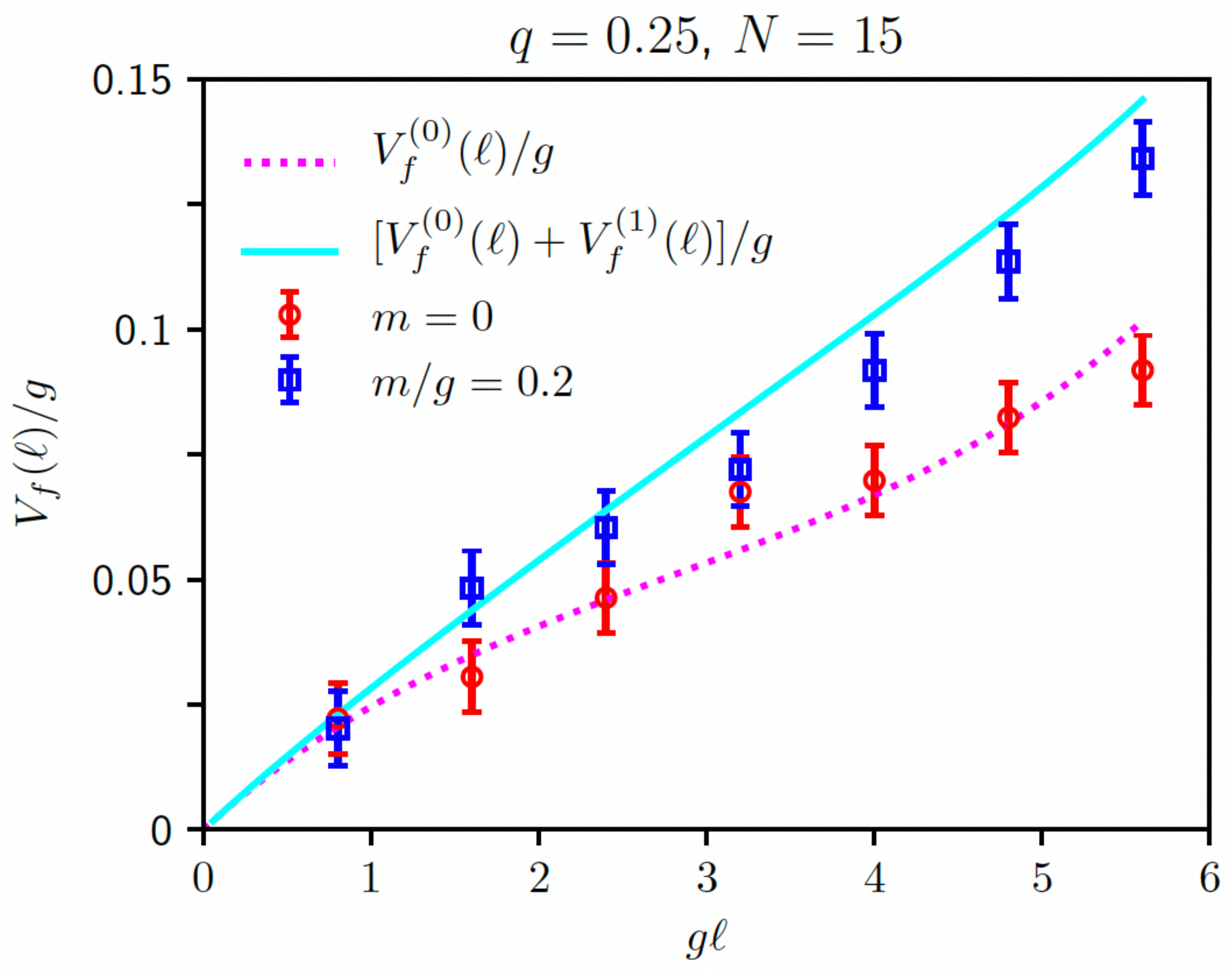


- Hamiltonian formalism (for Schwinger model)
ground state energy w/probe charges system

Measure $E(\ell) = \langle \Omega | H(\ell) | \Omega \rangle$ with several ℓ

potential $V(\ell) = E(\ell) - E(0)$

M.Honda, E.I., Y.Kikuchi, L.Nagano, T.Okuda,
Phys.Rev.D 105 (2022) 1, 01450



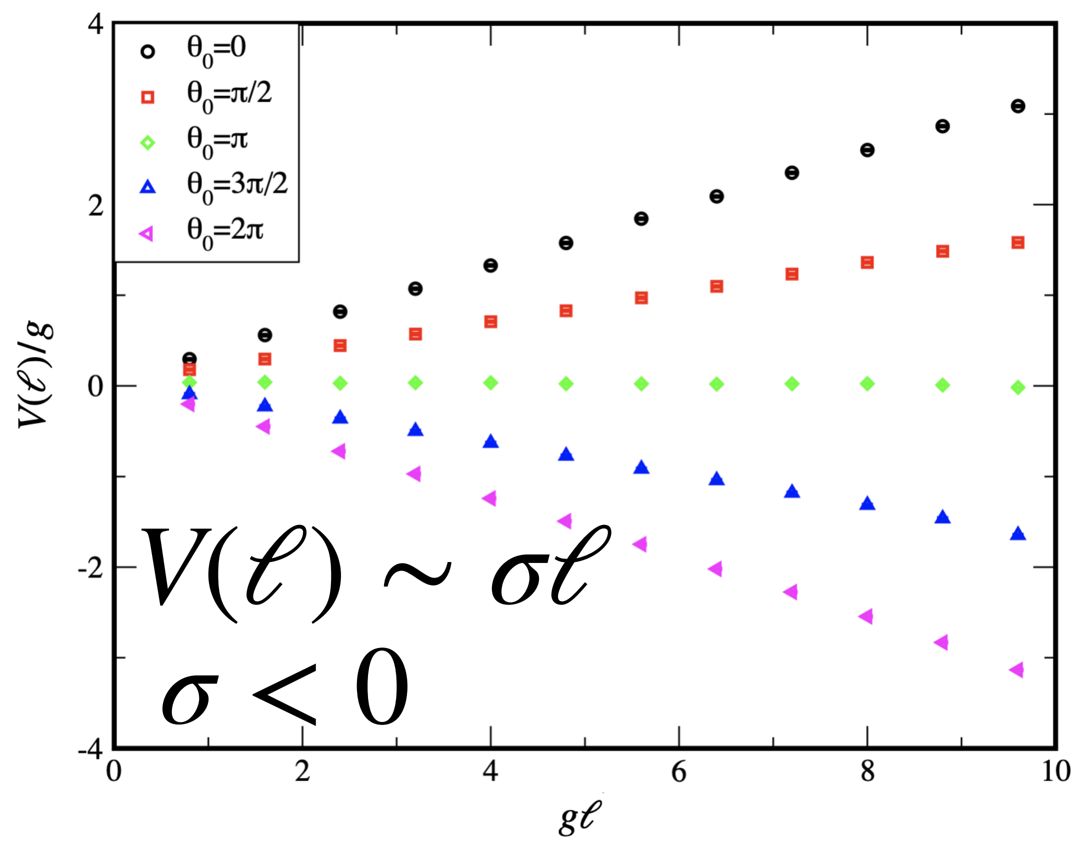
量子アルゴリズムを使った場の理論の研究

- 符号問題のある1+1次元量子電気学(QED)を拡張した理論のシミュレーション
  (古典電磁気学に粒子の生成消滅を許した)

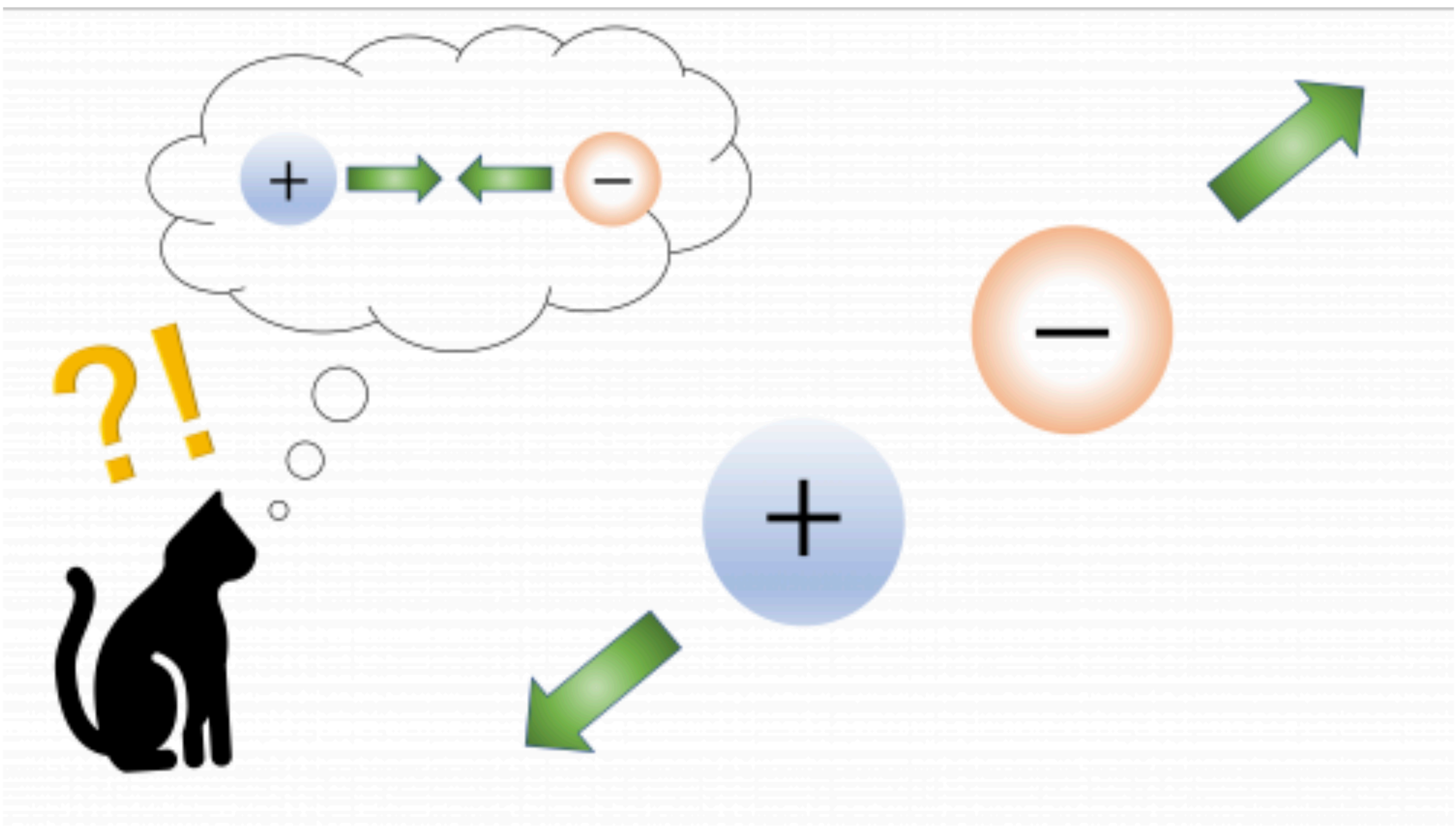
- (モンテカルロ法では符号問題の生じる)トポロジカルθ項を入れた計算.
  θが非常に大きい時, 反対の電荷間に斥力が生じる

- 実機は量子エラーの問題があるのでシミュレータを使った

私の最近の研究から



電荷が反対の粒子間に斥力が働く状況を実現 —量子アルゴリズムの新たな応用—



通常では電荷の正負が反対の粒子には引力が働くが（左）、逆に斥力が働く状況が起こりうる（右）

論文

"Negative string tension of higher-charge Schwinger model via digital quantum simulation"

M. Honda, E. Itou, Y. Kikuchi, Y. Tanizaki

https://academic.oup.com/ptep/article/2022/3/033B01/6507570

プレスリリース

https://www.yukawa.kyoto-u.ac.jp/research/r333

プレスリリース (京大・理研)
日刊工業新聞 (2022年3月3日　朝刊)
JPS hot topics (will appear)
物理学会誌「PTEPの最近の注目論文から」(will appear)