

量子計算の冷却原子物理への応用

大阪大学核物理研究センター(RCNP)理論部
土居 孝寛

共同研究者：

伊藤 悦子 (理研)

筒井 翔一郎 (理研)

田島 裕之 (東大)

Contents of this talk

1. Introduction&Motivation
2. 考える系：2-component Fermi gas with two impurities
3. 方法：どのように量子計算するか？
4. 困ったこと：初期状態依存性
5. 結果：まだなし
6. まとめ&展望

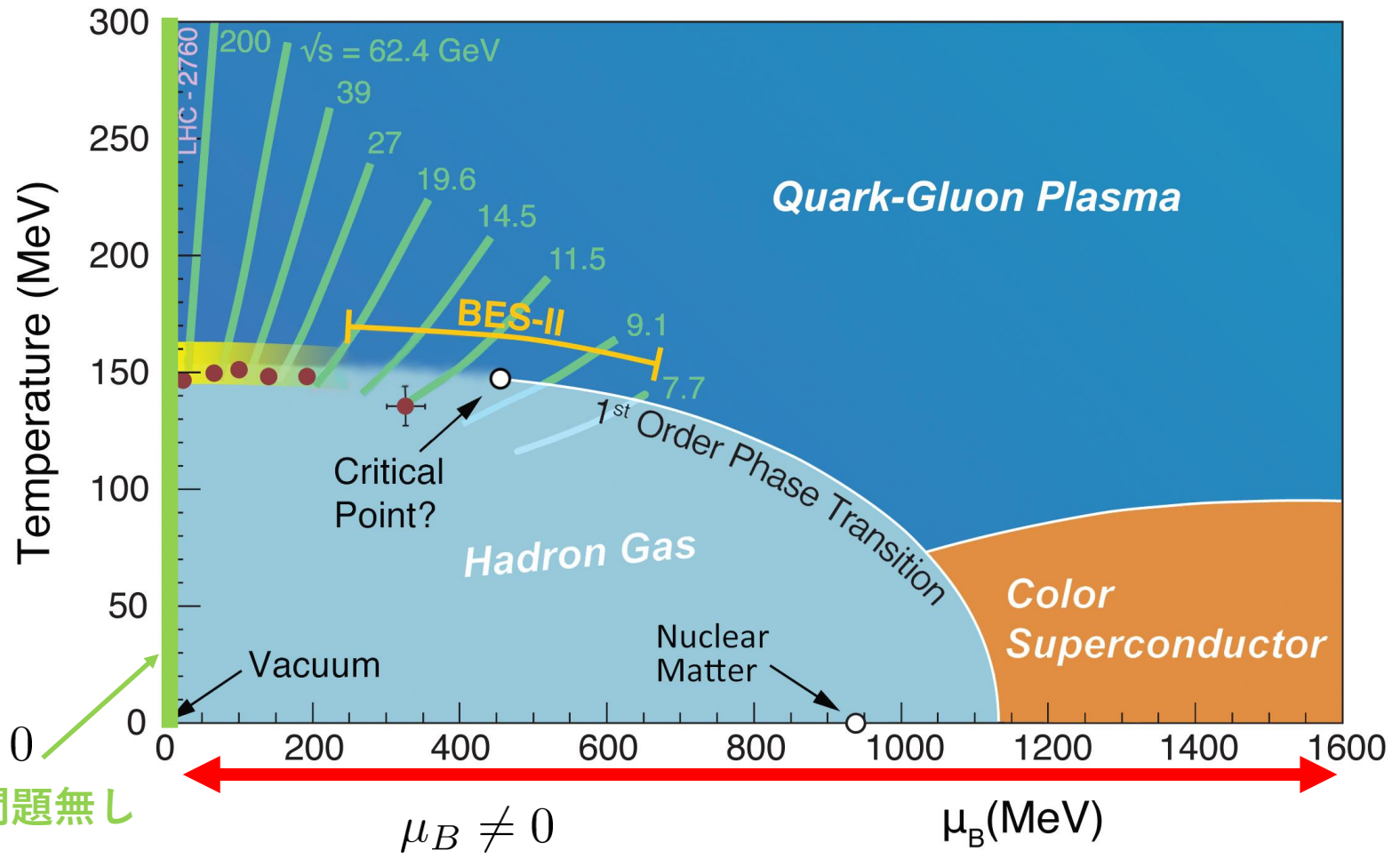
Contents of this talk

1. Introduction&Motivation

2. 考える系：2-component Fermi gas with two impurities
3. 方法：どのように量子計算するか？
4. 困ったこと：初期状態依存性
5. 結果：まだなし
6. まとめ&展望

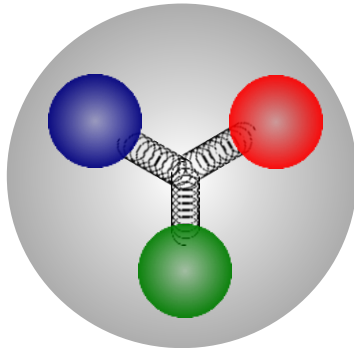
QCD相図(予想図)

Busza, Rajagopal, and Schee, Annual Review of Nuclear and Particle Science 68, 339 (2018)



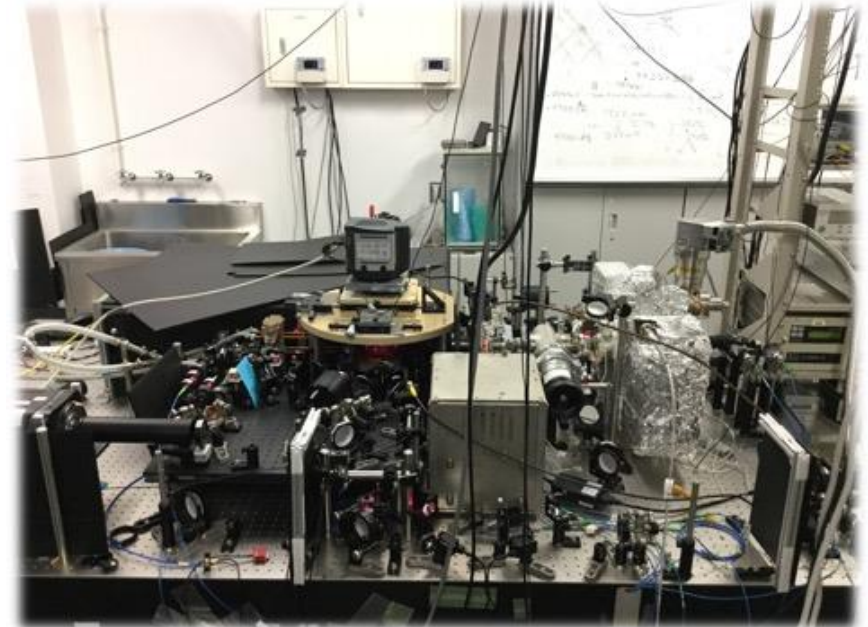
量子モンテカルロ法では
符号問題により計算困難

Quark & gluon



Cold atom

大阪市立大学 レーザー量子物理学研究室のwebpage
<http://www.sci.osaka-cu.ac.jp/phys/laser/>



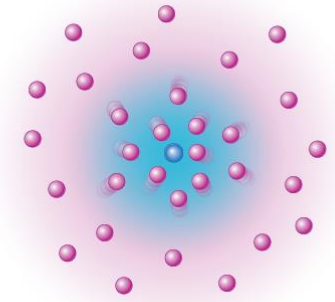
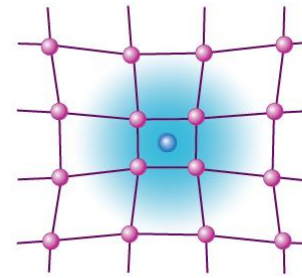
共通点：どちらもfermion系のため、同様の符号問題が出る

冷却原子系を考える利点：

- ・実験と理論の比較がQCDより容易
- ・理論を難しくしているゲージ場がない

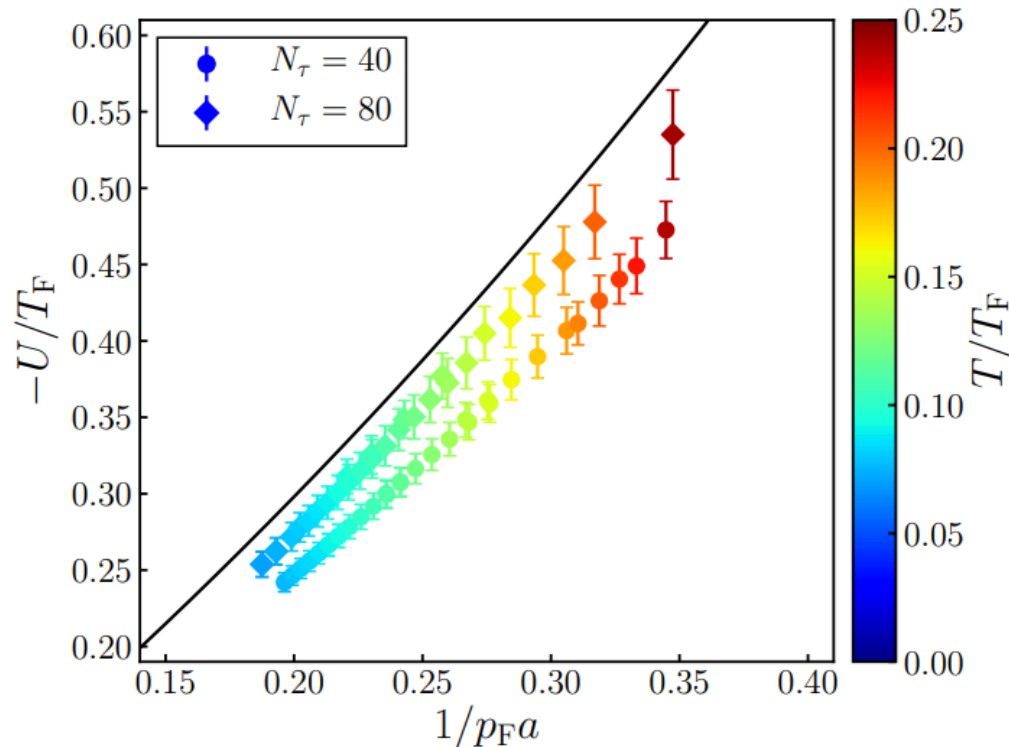
polaron:

多数の粒子との相互作用で
性質が変化した少数の異種粒子のこと。
大体重くなる。



<https://physics.aps.org/articles/v9/86>

Polaron energy of Gaudin-Yang model;
attractively interacting one-dimensional two-component Fermi gas in 1D



- 粒子数差があると符号問題あり
- 計算方法：複素ランジュバン法
- 連続極限(Nt 大)に近づくと
数値計算結果も厳密解(黒線)
に近づく
- 2D, 3Dが本命(まだ)

TMD, Hiroyuki Tajima, and Shoichiro Tsutsui
Phys. Rev. Research **3**, 033180 (2021)

2021年7月16日 RCNPにて伊藤さんのオンラインセミナー



Digital quantum simulation for screening and confinement in gauge theory with a topological term

Etsuko Ito
(RIKEN/ RCNP/Keio U.)

arXiv: 2105.03276 collaboration with M.Honda (YITP, Kyoto U.), Y.Kikuchi(BNL), L.Nagano, T.Okuda(U. of Tokyo)
Work in progress with M.Honda (YITP, Kyoto U.), Y.Kikuchi(BNL), Y.Tanizaki (YITP, Kyoto U.)

Seminar @ RCNP, Online, 2021/07/16

Digital quantum simulation for screening and confinement in gauge theory with a topological term

Etsuko Itou
(RIKEN/ RCNP/Keio U.)

arXiv: 2105.03276 collaboration with M.Honda (YITP, Kyoto U.), Y.Kikuchi(BNL), L.Nagano, T.Okuda(U. of Tokyo)
Work in progress with M.Honda (YITP, Kyoto U.), Y.Kikuchi(BNL), Y.Tanizaki (YITP, Kyoto U.)

Seminar @ RCNP, Online, 2021/07/16

量子計算楽しそう

ゲージ場が大変なら冷却原子でやればええやん

量子計算と冷却原子系、相性いいかも？

量子計算の特徴：

- 符号問題が無い(based on Hamilton formalism)
- △ ゲージ場(boson)の扱いが難しい、fermionは簡単
- × まだ使えるqubitの数が少ない

冷却原子系の特徴：

- × 基本的にfermion系には符号問題がある
- ゲージ場は居ない(いなくても面白い)
- 粒子数が少なくても面白い系がある

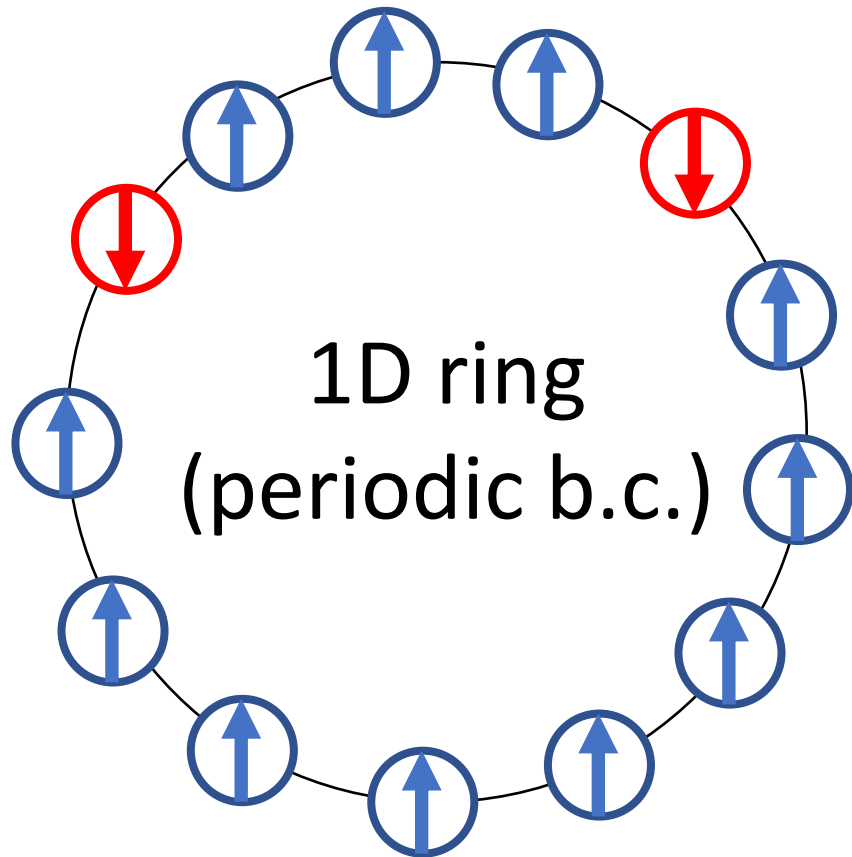
詳しくは明日2/25 15:30~の田島裕之さんのトーク

“Many-body effects and dynamics in a few-body cold atomic system”で

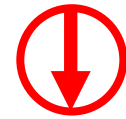
Contents of this talk

1. Introduction&Motivation
2. 考える系：2-component Fermi gas with two impurities
3. 方法：どのように量子計算するか？
4. 困ったこと：初期状態依存性
5. 結果：まだなし
6. まとめ&展望

問題設定：2-component Fermi gas with two impurities



: up



: down

mass

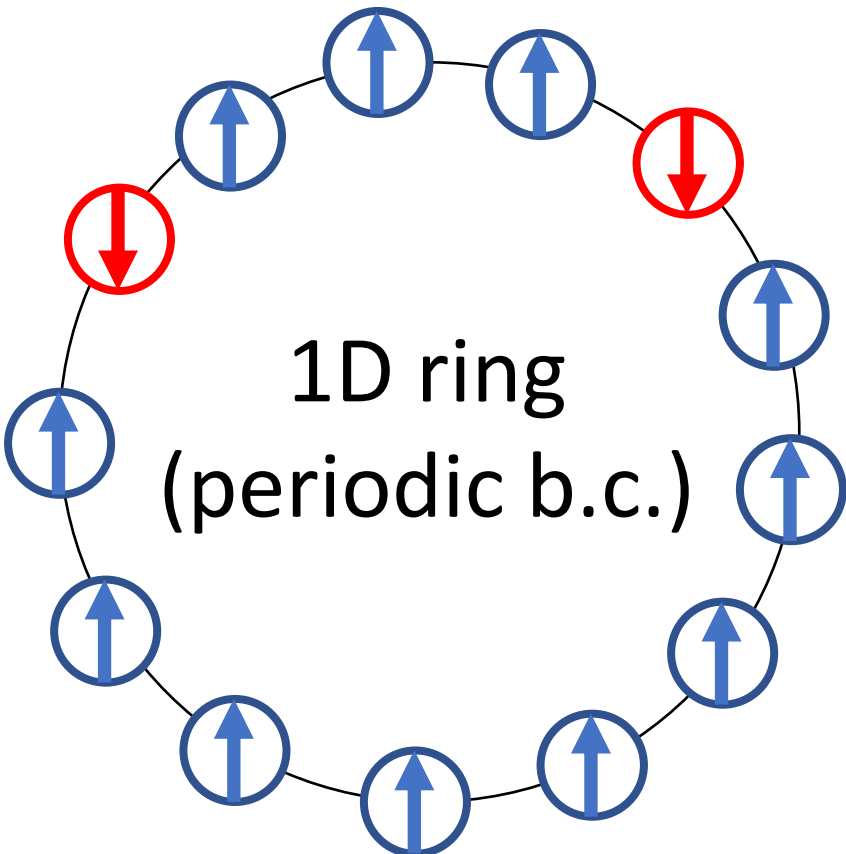
finite

∞

N

many

2



	: up	mass	N
	: down	finite	many
		∞	2

Hamiltonian
$$H = \sum_{i=1}^L \left[\overset{\text{kinetic term}}{-\frac{1}{2m} \left(c_i^\dagger c_{i+1} - 2c_i^\dagger c_i + c_{i+1}^\dagger c_i \right)} + \overset{\text{contact interaction}}{g n_\downarrow(i) c_i^\dagger c_i} \right]$$

i, L : site number & lattice size

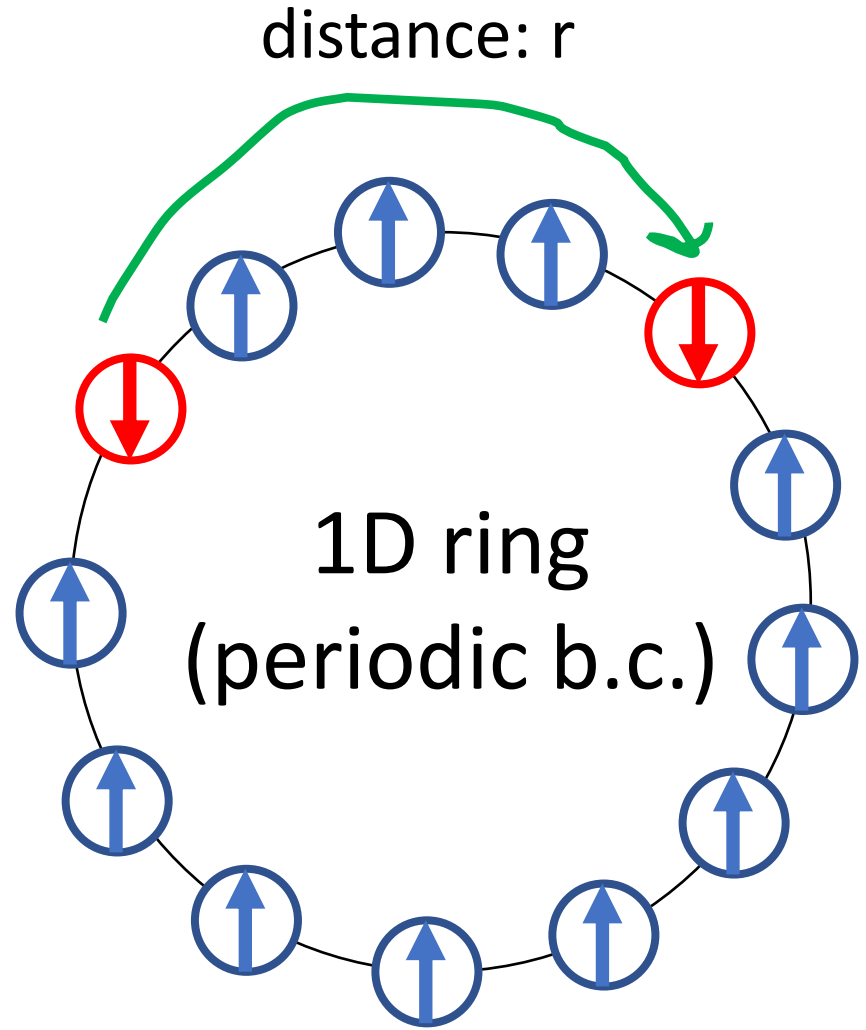
g : coupling constant

$c_i (c_i^\dagger)$: annihilation(creation) operator of up fermion

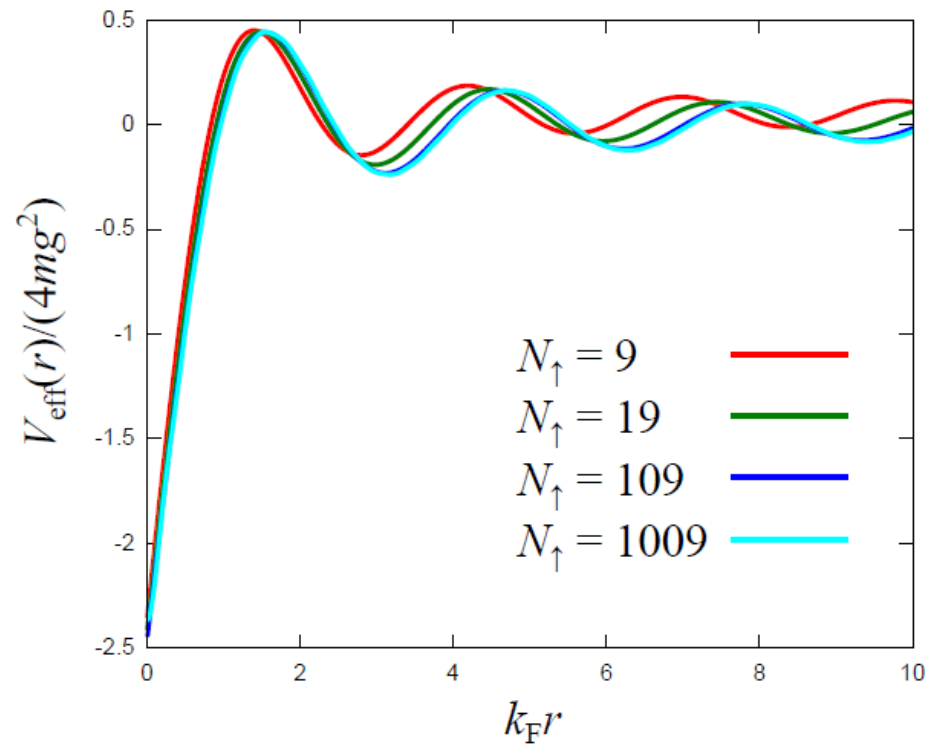
$n_\downarrow(i)$: density of down fermion

RKKY interaction: interaction between two impurities

M.A. Ruderman and C. Kittel: Phys. Rev. 96 (1954) 99;
 T. Kasuya: Prog. Theor. Phys. 16 (1956) 45;
 K. Yosida: Phys. Rev. 106 (1957) 893.



Results of second-order perturbation at thermodynamic limit by H. Tajima



Contents of this talk

1. Introduction&Motivation
2. 考える系：2-component Fermi gas with two impurities
3. 方法：どのように量子計算するか？
4. 困ったこと：初期状態依存性
5. 結果：まだなし
6. まとめ&展望

Rewrite Hamiltonian using spin operators

Hamiltonian $H = \sum_{i=1}^L \left[-\frac{1}{2m} \left(c_i^\dagger c_{i+1} - 2c_i^\dagger c_i + c_{i+1}^\dagger c_i \right) + g n_{\downarrow}(i) c_i^\dagger c_i \right]$

i, L : site number & lattice size

g : coupling constant

$c_i (c_i^\dagger)$: annihilation(creation) operator of up fermion $n_{\downarrow}(i)$: density of down fermion



Jordan-Wigner transformation

$$c_i = \frac{X_i - iY_i}{2} \prod_{j=1}^{i-1} (-iZ_j)$$

$$c_i^\dagger = \frac{X_i + iY_i}{2} \prod_{j=1}^{i-1} (+iZ_j)$$

X,Y,Z: Pauli matrix

Practice of Jordan-Wigner transformation

Hamiltonian $H = \sum_{i=1}^L \left[-\frac{1}{2m} \left(c_i^\dagger c_{i+1} - 2c_i^\dagger c_i + c_{i+1}^\dagger c_i \right) + gn_\downarrow(i) c_i^\dagger c_i \right]$

$$c_i = \frac{X_i - iY_i}{2} \prod_{j=1}^{i-1} (-iZ_j) \quad c_i^\dagger = \frac{X_i + iY_i}{2} \prod_{j=1}^{i-1} (+iZ_j)$$

$$\odot \quad c_i^\dagger c_i = \frac{X_i + iY_i}{2} \frac{X_i - iY_i}{2} = \frac{1 + Z_i}{2}$$

$$\odot \quad c_i^\dagger c_{i+1} = \frac{X_i + iY_i}{2} \frac{X_{i+1} - iY_{i+1}}{2} (-iZ_i)$$

$$= \frac{-Y_i + iX_i}{2} \frac{X_{i+1} - iY_{i+1}}{2}$$

$$\odot \quad c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i = \frac{X_i Y_{i+1} - Y_i X_{i+1}}{2}$$

Note on boundary term!

Hamiltonian $H = \sum_{i=1}^L \left[-\frac{1}{2m} \left(c_i^\dagger c_{i+1} - 2c_i^\dagger c_i + c_{i+1}^\dagger c_i \right) + gn_\downarrow(i) c_i^\dagger c_i \right]$

At boundary $i=L$, we impose $c_{L+1} = c_1$ by periodic b.c.

$$c_i = \frac{X_i - iY_i}{2} \prod_{j=1}^{i-1} (-iZ_j)$$

Then, transformation of boundary term is

$$c_i^\dagger = \frac{X_i + iY_i}{2} \prod_{j=1}^{i-1} (+iZ_j)$$

$$c_L^\dagger c_1 + c_1^\dagger c_L = -\frac{X_L Y_1 - Y_L X_1}{2} \prod_{j=2}^{L-1} (iZ_j) \quad (\text{for } L \text{ is even})$$

$$c_L^\dagger c_1 + c_1^\dagger c_L = -i \frac{X_L Y_1 + Y_L X_1}{2} \prod_{j=2}^{L-1} (iZ_j) \quad (\text{for } L \text{ is odd})$$

Rewrite Hamiltonian using spin operators

Hamiltonian
$$H = \sum_{i=1}^L \left[-\frac{1}{2m} \left(c_i^\dagger c_{i+1} - 2c_i^\dagger c_i + c_{i+1}^\dagger c_i \right) + gn_{\downarrow}(i)c_i^\dagger c_i \right]$$

i, L : site number & lattice size

g : coupling constant

$c_i (c_i^\dagger)$: annihilation(creation) operator of up fermion

$n_{\downarrow}(i)$: density of down fermion



Jordan-Wigner transformation

We consider only even L

$$c_i = \frac{X_i - iY_i}{2} \prod_{j=1}^{i-1} (-iZ_j)$$

$$c_i^\dagger = \frac{X_i + iY_i}{2} \prod_{j=1}^{i-1} (+iZ_j)$$

$$H = \sum_{i=1}^{L-1} \left[-\frac{1}{4m} (X_i Y_{i+1} - Y_i X_{i+1}) \right] + \sum_{i=1}^L \left[\frac{1 + Z_i}{2m} (1 + mgn_{\downarrow}(i)) \right] + \frac{X_L Y_1 - Y_L X_1}{4m} \prod_{j=2}^{L-1} (iZ_j)$$

hopping

on site

boundary

Adiabatic state preparation

$$H = \sum_{i=1}^{L-1} \left[-\frac{1}{4m} (X_i Y_{i+1} - Y_i X_{i+1}) \right] + \sum_{i=1}^L \left[\frac{1 + Z_i}{2m} (1 + mgn_{\downarrow}(i)) \right] + \frac{X_L Y_1 - Y_L X_1}{4m} \prod_{j=2}^{L-1} (iZ_j)$$

Prepare solvable Hamiltonian

$g=0$ (free fermion), $m \rightarrow m_0$: sufficiently large

$$H_0 = \sum_{i=1}^{L-1} \left[-\frac{1}{4m_0} (X_i Y_{i+1} - Y_i X_{i+1}) \right] + \sum_{i=1}^L \left[\frac{1 + Z_i}{2m_0} \right] + \frac{X_L Y_1 - Y_L X_1}{4m_0} \prod_{j=2}^{L-1} (iZ_j)$$

Due to adiabatic theorem, ground state of Hamiltonian is obtained :

$$|\text{GS}\rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \mathcal{T} \exp \left(-i \int_0^T dt H_A(t) \right) |\text{GS}_0\rangle \quad \begin{array}{l} H_A(0) = H_0 \\ H_A(T) = H \end{array}$$

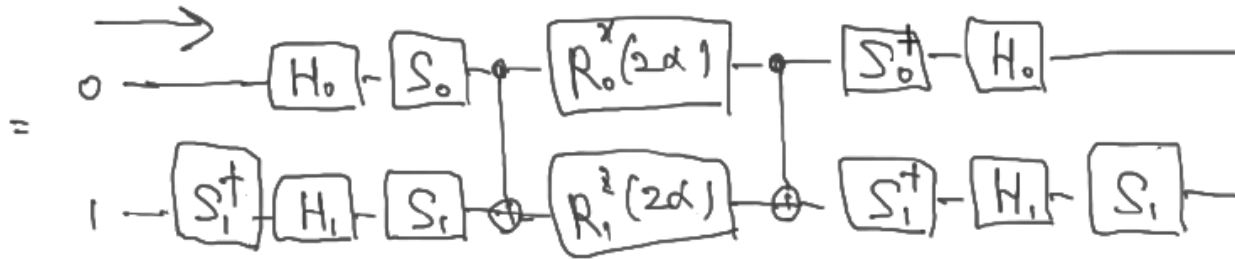
We choose initial state: $|\text{GS}_0\rangle = |0101\dots 01\rangle$

0: occupied
1: unoccupied

quantum circuit

$$H = \sum_{i=1}^{L-1} \left[-\frac{1}{4m} (X_i Y_{i+1} - Y_i X_{i+1}) \right] + \sum_{i=1}^L \left[\frac{1 + Z_i}{2m} (1 + mgn_{\downarrow}(i)) \right] + \frac{X_L Y_1 - Y_L X_1}{4m} \prod_{j=2}^{L-1} (i Z_i)$$

$$e^{-i\alpha(X_0 Y_1 - Y_0 X_1)} = S_1 H_1 S_1^\dagger H_0 S_0^\dagger \cdot C X_{01} \cdot R_0^x(2\alpha) R_1^z(2\alpha) C X_{01} \cdot S_0 H_0 \cdot S_1 H_1 S_1^\dagger$$



$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}, S^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}, X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

quantum circuit

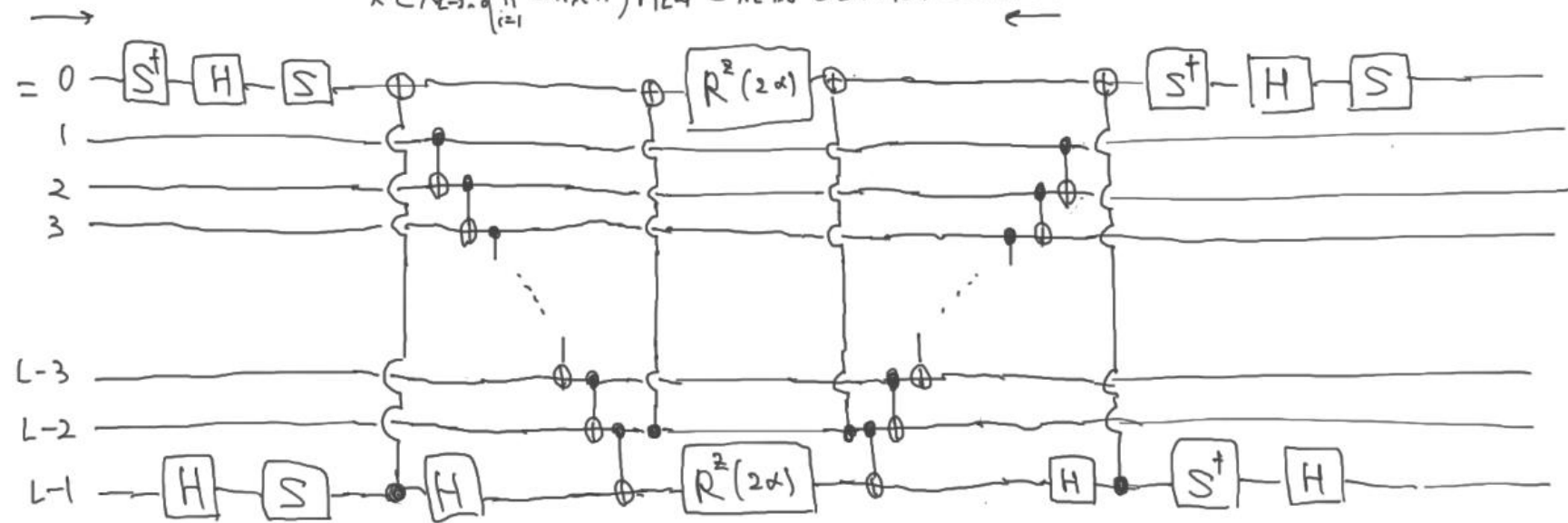
$$H = \sum_{i=1}^{L-1} \left[-\frac{1}{4m} (X_i Y_{i+1} - Y_i X_{i+1}) \right] + \sum_{i=1}^L \left[\frac{1 + Z_i}{2m} (1 + mgn_{\downarrow}(i)) \right] + \frac{X_L Y_1 - Y_L X_1}{4m} \prod_{j=2}^{L-1} (i Z_i)$$

Ex.
$$-i\alpha (X_{L-1} Y_0 - Y_{L-1} X_0) \prod_{i=1}^{L-2} Z_i$$

$$= S_0 \cdot H_0 \cdot S_0^\dagger \cdot H_{L-1} \cdot S_{L-1}^\dagger \cdot CX_{L-1,0} \cdot H_{L-1} \left(\prod_{i=1}^{L-2} CX_{i,i+1} \right) \cdot CX_{L-2,0} \\ \times R_0^2(2\alpha) \cdot R_{L-1}^2(2\alpha) \times \\ \times CX_{L-2,0} \left(\prod_{i=1}^{L-2} CX_{i,i+1} \right) H_{L-1} \cdot CX_{L-1,0} \cdot S_{L-1} \cdot H_{L-1} \cdot S_0 \cdot H_0 \cdot S_0^\dagger$$

実際の α は

$$\alpha = \frac{1}{4m} (-1)^{\frac{L-1}{2}}$$



Contents of this talk

1. Introduction&Motivation
2. 考える系：2-component Fermi gas with two impurities
3. 方法：どのように量子計算するか？
4. 困ったこと：初期状態依存性
5. 結果：まだなし
6. まとめ&展望

Adiabatic state preparation

$$H = \sum_{i=1}^{L-1} \left[-\frac{1}{4m} (X_i Y_{i+1} - Y_i X_{i+1}) \right] + \sum_{i=1}^L \left[\frac{1 + Z_i}{2m} (1 + mgn_{\downarrow}(i)) \right] + \frac{X_L Y_1 - Y_L X_1}{4m} \prod_{j=2}^{L-1} (iZ_j)$$

Prepare solvable Hamiltonian

$g=0$ (free fermion), $m \rightarrow m_0$: sufficiently large

$$H_0 = \sum_{i=1}^{L-1} \left[-\frac{1}{4m_0} (X_i Y_{i+1} - Y_i X_{i+1}) \right] + \sum_{i=1}^L \left[\frac{1 + Z_i}{2m_0} \right] + \frac{X_L Y_1 - Y_L X_1}{4m_0} \prod_{j=2}^{L-1} (iZ_j)$$

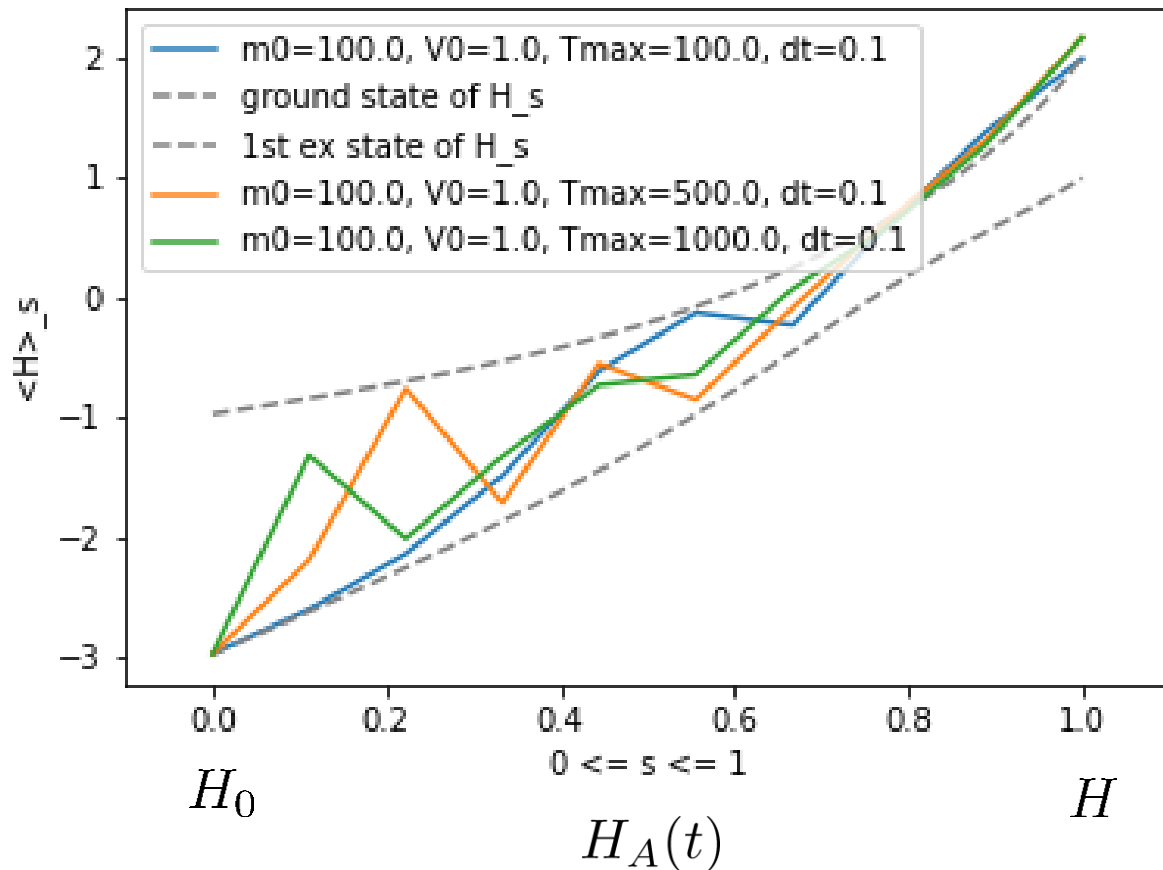
そもそも m_0 無限大の極限で H_0 の基底状態は縮退する
→断熱定理の条件を満たさない

そこで、初期状態の $|\text{GS}_0\rangle = |0101\dots 01\rangle$ が唯一の基底状態になるように

$H_0 - \sum_i V_0 \cos(\pi i) c_i^\dagger c_i$ の1体ポテンシャルを考えた。 (V_0 は定数パラメータ)

とりあえずfree fermion($g=0$) を再現するか確認

T1005001000_exp_dt_overlap



計算 : Qiskit
(gate計算のsimulator)

横軸 : $s=t/T$ in $[0,1]$

縦軸 : 時間発展途中の
Hamiltonian $H_A(t)$ の期待値

$L=6, m=1, g=0, N=3$

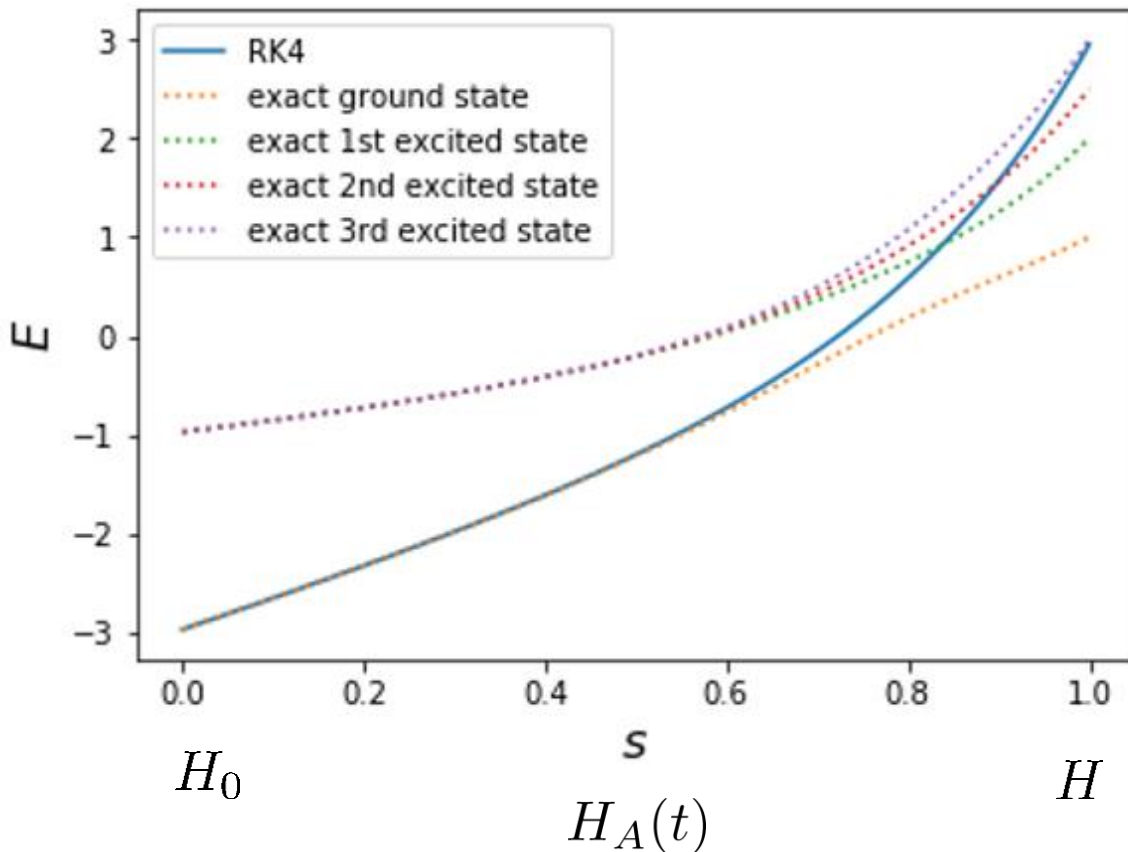
$m_0 = 100.0, V_0 = 1.0$

初期状態

$|\text{GS}_0\rangle = |0101\dots 01\rangle$

途中で第一励起状態に遷移している・・・？
時間幅を小さくしても結果は変わらない。

同じ計算をRunge-Kuttaでやってみる



計算：Runge-Kutta

横軸： $s=t/T$ in $[0,1]$

縦軸：時間発展途中の
Hamiltonian $H_A(t)$ の期待値

$$L=6, m=1, g=0, N=3$$
$$m_0 = 100.0, V_0 = 1.0$$

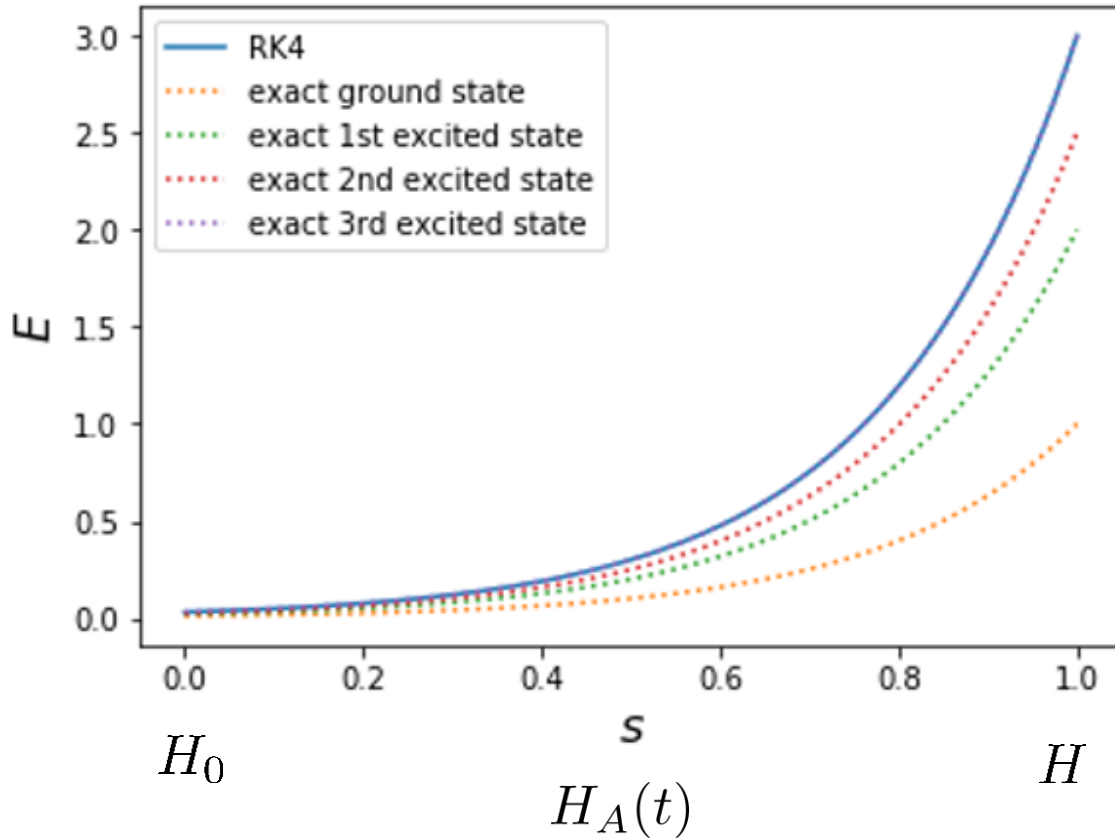
初期状態

$$|GS_0\rangle = |0101\dots 01\rangle$$

途中で第三励起状態に遷移している・・・？

Qiskitでやった計算とsetupが完全に同じなのに・・・？

$V_0 = 0$ としてみる。



計算：Runge-Kutta

横軸： $s=t/T$ in $[0,1]$

縦軸：時間発展途中の
Hamiltonian $H_A(t)$ の期待値

$L=6, m=1, g=0, N=3$

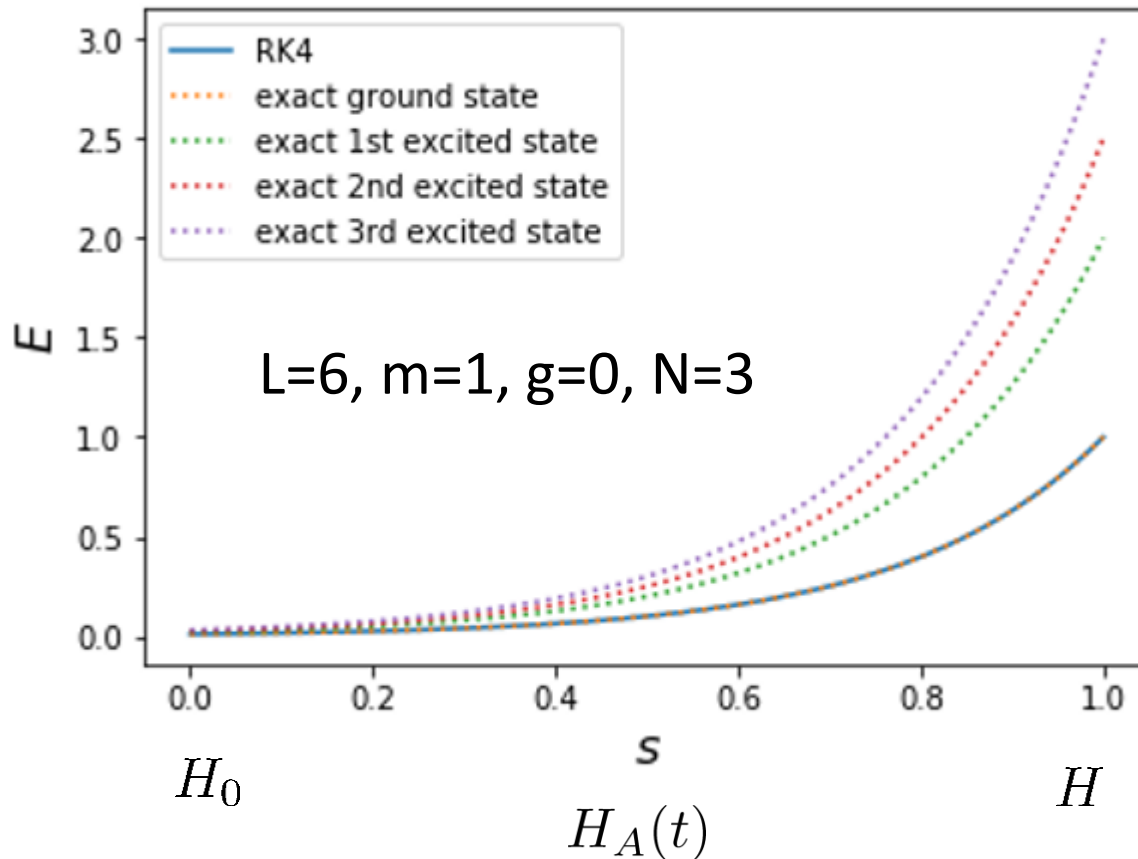
$m_0 = 100.0, V_0 = 0.0$

初期状態

$|\text{GS}_0\rangle = |0101\dots01\rangle$

やっぱり第三励起状態に遷移している・・・？
初期状態が悪そうだ。

初期状態として H_0 のexactな固有状態を持ってくる



計算：Runge-Kutta

横軸： $s=t/T$ in $[0,1]$

縦軸：時間発展途中の
Hamiltonian $H_A(t)$ の期待値

$L=6, m=1, g=0, N=3$

$m_0 = 100.0, V_0 = 0.0$

初期状態: exactな $|GS_0\rangle$

これはうまくいった。

観測事実：初期状態の基底状態からのずれが少しあるだけで計算が不安定になる。原因はまだわからず。

Contents of this talk

1. Introduction&Motivation
2. 考える系：2-component Fermi gas with two impurities
3. 方法：どのように量子計算するか？
4. 困ったこと：初期状態依存性
5. 結果：まだなし
6. まとめ&展望

Contents of this talk

1. Introduction&Motivation
2. 考える系：2-component Fermi gas with two impurities
3. 方法：どのように量子計算するか？
4. 困ったこと：初期状態依存性
5. 結果：まだなし
6. まとめ&展望

まとめ

- ・ 冷却原子系(fermion with contact interaction)の符号問題が出るタイプの問題に量子計算でアプローチする方法を考えた。
- ・ 周期境界条件も込みでHamiltonian formalismで計算可能であることがわかった。
- ・ freeの結果を再現するbenchmark testをしようとしたが、逆に難しい問題だったかもしれない。

展望

Adiabatic state preparationをやめて、変分法に切り替える

$$|\text{GS}\rangle = \exp(-i\alpha H) \exp(-i\beta H) \exp(-i\gamma H) |\text{GS}_0\rangle$$

variational parameters α, β, γ



物理：RKKY振動を見た後は、FFLO、実時間発展など、符号問題が現れる難しい問題にアタックしたい