

ボソン系の量子計算に向けて

2023年10月11日 大阪大学南部陽一郎ホール

手塚真樹（京都大学理学研究科）

構成

- はじめに：ボソン系を扱う動機と、計算にあたっての問題
 - 固体物理：電子-フォノン相互作用系を例として
 - 行列模型：カットオフの導入
 - 空間の離散化：テンソルネットワークを用いた例
- 1次元調和振動子の量子力学の復習（ここから黒板か iPad）
- 離散化：有限自由度での取り扱い
- ボソン系の離散化の影響評価 [Hanada-Liu-Rinaldi-MT 2023]
 - 経路積分とモンテカルロ法、負符号問題について
 - 簡単な例：1個の調和振動子
 - もう少し複雑な例：空間2次元の自由スカラー場
- まとめ

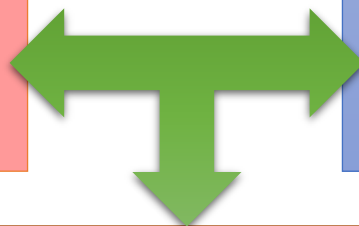
Introduction

量子計算

- Rapid progress in device development
- さまざまな物理系の量子シミュレーション
- **有限個の量子ビット**(または qudit)、有限次元空間

ボソン自由度

- フォノン
- ボース統計に従う冷却原子気体
- 光量子と物質の相互作用: cavity QEDなど
- 非可換ゲージ理論
- **無限個の準位: カットオフ必要**



カットオフの効果:

ある場合には、符号問題のないモンテカルロ(古典計算)で評価可能

問い

- ボソン系を扱うために、連続自由度を離散化するが
- その影響を古典計算で評価できるか？

ボソン系を扱う動機(1) フォノン

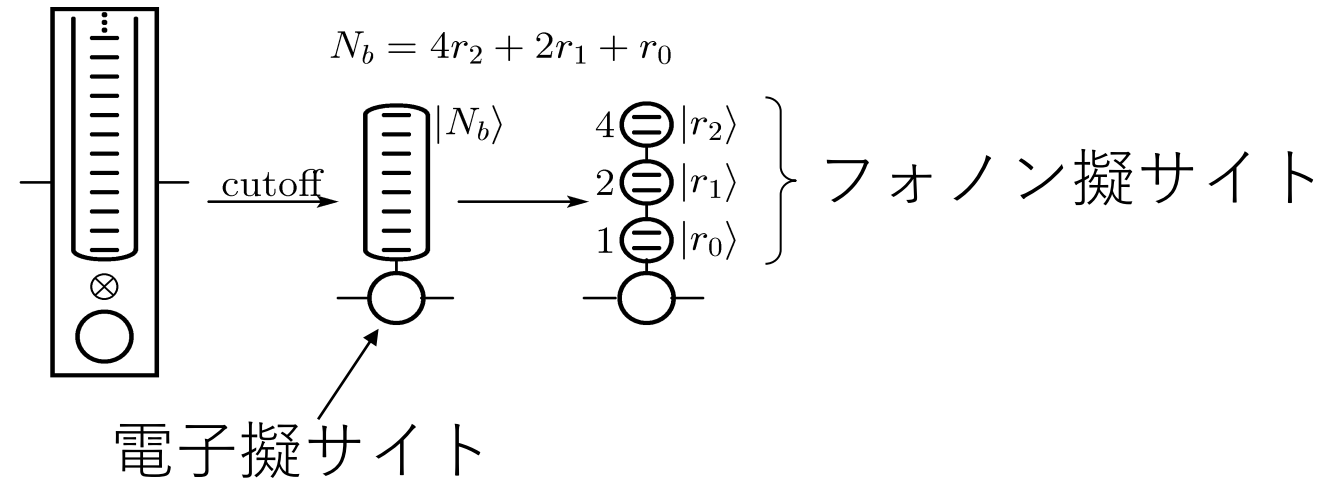
- 固体中のフォノン：典型的に数十 meV（遅い）
 - 例：デバイ模型 $\omega = c|\mathbf{k}|$: $\omega_D^3 = 6\pi^2 n c^3$ \mathbf{k} : 波数 c : 音速 n : 原子密度
- 電子のバンド幅：典型的に数 eV（速い）
- 電子に比べてイオンが遅いとみる: Migdal 近似

- **成り立たない物質多数**
 - フォノンのエネルギースケールが大きい（硬い分子の変形等）
 - 電子のエネルギースケールが小さい（強相関物質, フラットバンド）
- 電子相関と、電子フォノン相互作用を対等に扱う必要

テンソルネットワークによる扱い

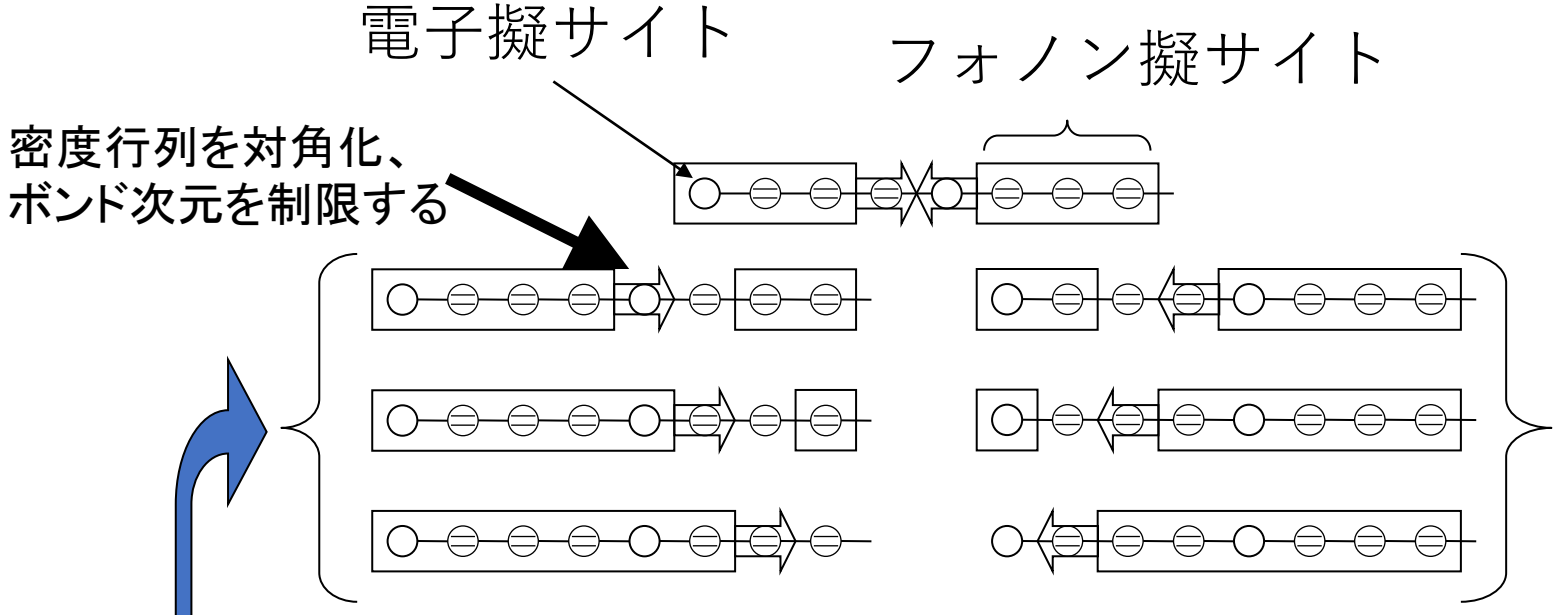
- DMRG (密度行列繰り込み群) 擬サイト法
 - E. Jeckelmann and S.R. White, PRB 57, 6376 (1998)

サイトあたりの自由度が大きいの → 分割する



→ Hubbard-Holstein模型 (フォノンの分散がなく、電子サイトと結合した調和振動子として扱える) に適用した例
M. Tezuka, R. Arita, and H. Aoki, PRL 95, 226401 (2005); PRB 76, 155114 (2007)

DMRGによる電子-フォノン系の計算



直前の状態から変換行列により近似的な波動関数を得て、改良
[see S. R. White, PRL 77, 3633 (1996)]

MT, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 053001 (2007)

必要なサイト数に到達したら、有限系のアルゴリズムでボンド次元を増やしながら波動関数を改善する。

ボソン系を扱う動機(2) 行列模型

- ゲージ重力対応: 重力を含まない量子系から、量子重力を調べる
- **Yang-Mills型行列模型: M理論** (5つの超弦理論を統合) 等の文脈で注目されてきた [Itzhaki-Maldacena-Sonnenschein 1998; Banks-Fischler-Shenker-Susskind 1997; de Wit-Hoppe-Nicolai 1988; Berenstein-Maldacena-Nastase 2002 等]
- ボソン型の例
- d 個の、トレースが0の N 次元エルミート行列 $X_1(t), \dots, X_d(t)$ を考える。
- $$S = \int dt \operatorname{Tr} \left(\frac{1}{2} \sum_I (D_t X_I)^2 - \frac{m^2}{2} \sum_I X_I^2 + \frac{g^2}{4} \sum_{I \neq J} [X_I, X_J]^2 \right),$$
- $D_t \cdot = \partial_t \cdot - i[A_t, \cdot]$, A_t はゲージ場

演算子形式

- $\hat{H} = \text{Tr} \left(\frac{1}{2} \hat{P}_I^2 + \frac{m^2}{2} \hat{X}_I^2 - \frac{g^2}{4} [\hat{X}_I, \hat{X}_J]^2 \right)$, $\hat{P}_I = \sum_{\alpha=1}^{N^2-1} \hat{P}_{I\alpha} \tau_\alpha$, $\hat{X}_I = \sum_{\alpha=1}^{N^2-1} \hat{X}_{I\alpha} \tau_\alpha$
- τ_α は $SU(N)$ の生成子 $\text{Tr}(\tau_\alpha \tau_\beta) = \delta_{\alpha\beta}$
- $[\hat{X}_{I\alpha}, \hat{P}_{I\beta}] = i\delta_{IJ} \delta_{\alpha\beta}$
- \hat{H} や正準交換関係は、 $SU(N)$ に属する変換で不変なゲージ一重項
 - 一重項の張るヒルベルト空間 \mathcal{H}_{inv} とする
- 一重項以外も含むヒルベルト空間 \mathcal{H}_{ext} を考えて \hat{P}_I, \hat{X}_I を定義
- \mathcal{H}_{ext} での経路積分で正しく計算できる

[e.g. M. Hanada, PRD 103, 106007 (2021);

M. Hanada, H. Shimada, and N. Wintergerst, JHEP08(2021)039]

カットオフの導入

E. Rinaldi, X. Han, M. Hassan, Y. Feng, F. Nori, M. McGuigan,
and M. Hanada, PRX Quantum 3, 010324 (2022)

- $\hat{H} = \text{Tr} \left(\frac{1}{2} \hat{P}_I^2 + \frac{m^2}{2} \hat{X}_I^2 - \frac{g^2}{4} [\hat{X}_I, \hat{X}_J]^2 \right)$, $\hat{P}_I = \sum_{\alpha=1}^{N^2-1} \hat{P}_{I\alpha} \tau_{\alpha}$, $\hat{X}_I = \sum_{\alpha=1}^{N^2-1} \hat{X}_{I\alpha} \tau_{\alpha}$
- $\hat{H} = \sum_{\alpha,I} \left(\frac{1}{2} \hat{P}_{I\alpha}^2 + \frac{m^2}{2} \hat{X}_{I\alpha}^2 \right) + \frac{g^2}{4} \sum_{\gamma,I,J} \left(\sum_{\alpha,\beta} f_{\alpha\beta\gamma} \hat{X}_{I\alpha} \hat{X}_{J\beta} \right)^2$ の形に書ける。
- 生成消滅演算子 $\hat{a}_{I\alpha}^{\dagger} = \sqrt{\frac{m}{2}} \hat{X}_{I\alpha} - \frac{i\hat{P}_{I\alpha}}{\sqrt{2m}}$, $\hat{a}_{I\alpha} = \sqrt{\frac{m}{2}} \hat{X}_{I\alpha} + \frac{i\hat{P}_{I\alpha}}{\sqrt{2m}}$ を導入
- $\hat{H} = m \sum_{\alpha,I} \left(\hat{n}_{I\alpha} + \frac{1}{2} \right) + \frac{g^2}{16m^2} \sum_{\gamma,I,J} \left(\sum_{\alpha,\beta} f_{\alpha\beta\gamma} (\hat{a}_{I\alpha} + \hat{a}_{I\alpha}^{\dagger}) (\hat{a}_{J\beta} + \hat{a}_{J\beta}^{\dagger}) \right)^2$
- ゲージ変換の生成子 $\hat{G}_{\alpha} = i \sum_{\beta,\gamma,I} f_{\alpha\beta\gamma} \hat{a}_{I\beta}^{\dagger} \hat{a}_{I\gamma}$ は \hat{H} と交換
- 各 (I, α) について $|0\rangle_{I\alpha}$ を $\hat{a}_{I\alpha} |0\rangle_{I\alpha} = 0$, $|n\rangle_{I\alpha} = \frac{(\hat{a}_{I\alpha}^{\dagger})^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle_{I\alpha}$
- $0, \dots, \Lambda - 1 = 2^K - 1$ までの準位に制限した演算子 $\hat{a}_{I\alpha, \text{truncated}}$ を導入
- ゲージ不変ではなくなるが、 K 個の量子ビットで扱える

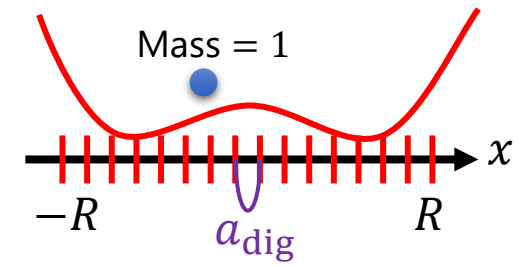
ボソン系の離散化の影響評価

- ここでは、場の値の離散化の効果を主に扱う
 - 最大値, 最小値は充分大きくとる
- 同じ方法で、カットオフの大きさの効果も評価可能
- 例1. 1個の非調和振動子
- 例2. 2次元正方格子上の自由スカラー場

例1: 1個の非調和振動子 $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + V(x)$

- 配位: 1個の整数 $n \in \{0, 1, \dots, \Lambda - 1\}$ を各虚時間ステップで考える
 $j \in \{1, 2, \dots, K\}$

$$x(n) = -R + na_{\text{dig}}, a_{\text{dig}} \equiv \frac{2R}{\Lambda - 1}$$



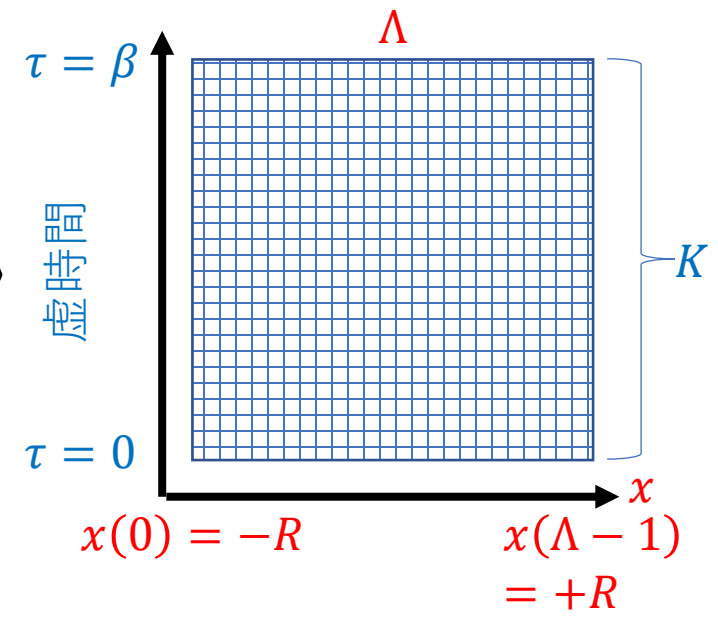
- 分配関数 逆温度 $\beta = K\Delta$

$$Z(\beta) = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}}$$

$$\simeq \sum_{n^{(1)}, \dots, n^{(K)}} \langle n^{(1)} | e^{-\Delta \hat{H}} | n^{(2)} \rangle \langle n^{(2)} | e^{-\Delta \hat{H}} | n^{(3)} \rangle \dots \langle n^{(K)} | e^{-\Delta \hat{H}} | n^{(1)} \rangle$$

- 運動エネルギー一項の近似

$$\hat{p}^2 = (-i\nabla)^2 = \frac{1}{a_{\text{dig}}^2} \{2|n\rangle\langle n| - (|n+1\rangle\langle n| + \text{c.c.})\}$$



$\hbar = 1$ in this talk

例1: 1個の非調和振動子 $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + V(x)$

- 逆温度 $\beta = \Delta \times K$ での分配関数

$$x(n) = -R + na_{\text{dig}}, \\ n \in \{0, 1, \dots, \Lambda - 1\}$$

$$Z(\beta) = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}} \simeq \sum_{n^{(1)}, \dots, n^{(K)}} \langle n^{(1)} | e^{-\Delta \hat{H}} | n^{(2)} \rangle \langle n^{(2)} | e^{-\Delta \hat{H}} | n^{(3)} \rangle \dots \langle n^{(K)} | e^{-\Delta \hat{H}} | n^{(1)} \rangle$$

- $\langle n^{(j)} | e^{-\Delta \hat{H}} | n^{(j+1)} \rangle \simeq \left\langle n^{(j)} \left| \exp \left(-\Delta \frac{\hat{p}^2}{2} \right) \right| n^{(j+1)} \right\rangle \exp \left(-\Delta V \left(x(n^{(j+1)}) \right) \right) \quad (|\Delta| \ll 1)$

- $\left\langle n^{(j)} \left| \exp \left(-\Delta \frac{\hat{p}^2}{2} \right) \right| n^{(j+1)} \right\rangle \simeq \left\{ \left(1 - \frac{\Delta}{a_{\text{dig}}^2} \right) \delta_{n^{(j)}, n^{(j+1)}} + \frac{\Delta}{2a_{\text{dig}}^2} \left(\delta_{\vec{n}^{(j)}, \vec{n}^{(j+1)} + 1} + \delta_{\vec{n}^{(j)}, \vec{n}^{(j+1)} - 1} \right) \right\}$

は $1 - \frac{\Delta}{a_{\text{dig}}^2} > 0$ のとき $n^{(j)}, n^{(j+1)}$ によらず非負。

- 符号問題なしのモンテカルロ計算が可能。

Markov Chain Monte Carlo: 更新法 (1)

- 当初の配位: すべての $n^{(j)} = \frac{\Lambda}{2}, j = 1, 2, \dots, K (= \frac{\beta}{\Delta})$

1サイトごとの (局所) 更新

- 提案: $n^{(j)}$ を ± 1 ずらして n' にする (確率 $\frac{1}{2}$)

- 下記を満たさない場合却下:

- $0 \leq n' \leq \Lambda - 1$

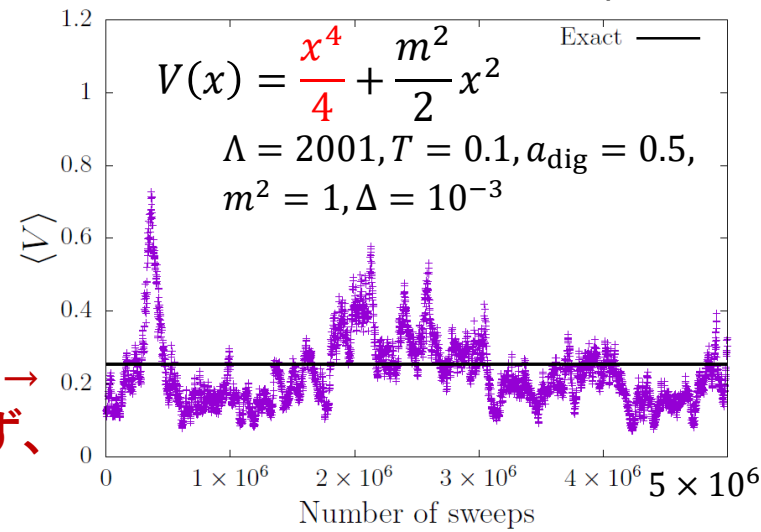
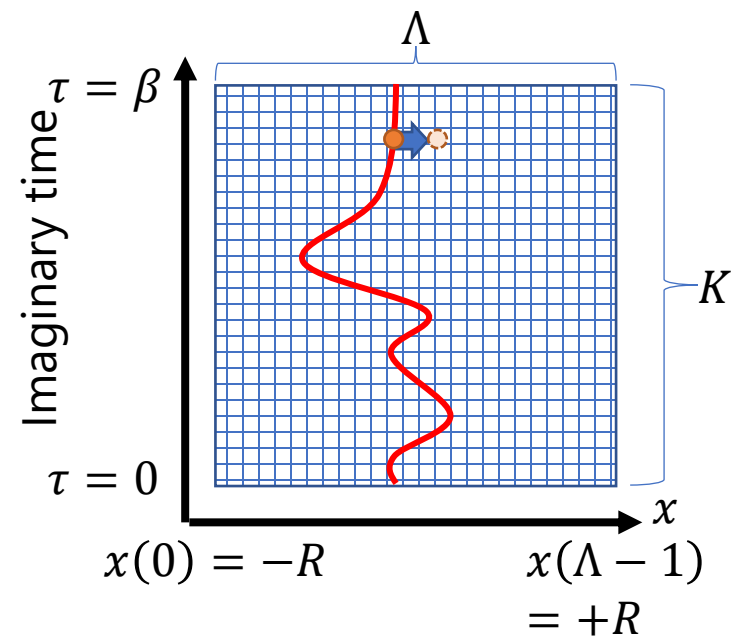
- $|n' - n^{(j+1)}| = 0 \text{ or } 1, |n' - n^{(j-1)}| = 0 \text{ or } 1$

- Metropolis テスト: 採択確率 $\min(1, e^{-\delta S})$

- δS は作用 S の増分 ($Z = e^{-S}$)

➤ 非効率 (物理量はほとんど変化しない)

1回の sweep: 各 j で1回試行→
(実現した遷移回数によらず、
一定頻度で物理量を測定)



Markov Chain Monte Carlo: 更新法 (2)

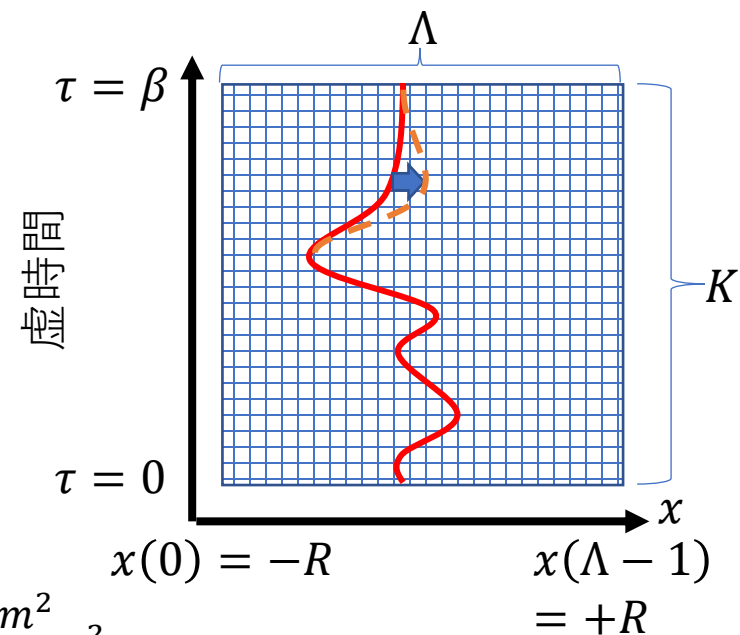
- 当初の配位: すべての $n^{(j)} = \frac{\Lambda}{2}, j = 1, 2, \dots, K (= \frac{\beta}{\Delta})$

クラスタ (ブロック) 更新

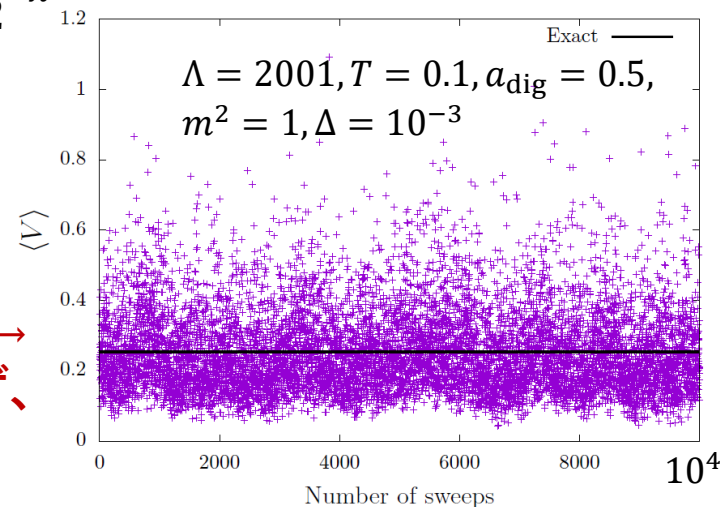
- ランダムなブロック長 $1 \leq B \leq B_{\max} = \frac{K}{2}$
- 提案: $n^{(j)}, n^{(j+1)}, \dots, n^{(j+B)}$ を ± 1 ずらす
 - 下記を満たさない場合却下:
 - $0 \leq n'^{(j)}, \dots, n'^{(j+B)} \leq \Lambda - 1$
 - $|n'^{(j+B)} - n^{(j+B+1)}| = 0 \text{ or } 1, |n'^{(j)} - n^{(j-1)}| = 0 \text{ or } 1$
- Metropolis テスト: 採択確率 $\min(1, e^{-\delta S})$
 - δS は作用 S の増分

➤ 自己相関長の短い、効率的な更新

1回の sweep: 各 j で1回試行→
(実現した遷移回数によらず、
一定頻度で物理量を測定)



$$V(x) = \frac{x^4}{4} + \frac{m^2}{2} x^2$$



例1: 1個の **非調和** 振動子 $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + V(x)$

- $V(x) = \frac{x^4}{4} + \frac{m^2}{2}x^2$, a_{dig} や m^2 への依存性を見たい
- $\langle V \rangle_{T=0.1}$: 10^4 回の sweep (各 j でブロック更新を試行後 V を測定) にわたる平均
 - カットオフはここでは大きくとる: $R = 1000a_{\text{dig}}$, $\Lambda = 2R + 1 = 2001$ $\frac{\Delta}{a_{\text{dig}}^2} \ll 1$

a_{dig}	$m^2 = 1.0$, MC	$m^2 = 1.0$, Exact	$m^2 = -1.0$, MC	$m^2 = -1.0$, Exact
0.3	0.2626(26)	0.2618	-0.06326(68)	-0.06354
0.5	0.2533(53)	0.2539	-0.0664(27)	-0.06633
0.7	0.2482(70)	0.2414	-0.0717(18)	-0.07024

- 各 a_{dig} で、Monte Carlo (MC) の結果 ($\Delta = 10^{-3}$) は厳密対角化 (Exact) と整合

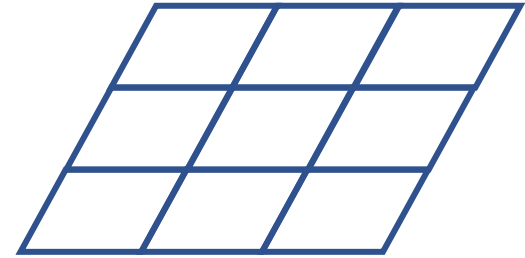
⇔ より大きなシステムでは厳密対角化不可能

➤ MCMC は符号問題なく適用できる!

例2: 2次元自由スカラー一場

- 正方 d 次元格子, $N_{\text{bos}} = L^d$ 個のボソン

$$\hat{H}_{\text{lat}} = \sum_{\vec{n}} \left(\frac{1}{2} \hat{\pi}_{\vec{n}}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^d (\hat{\phi}_{\vec{n}+\hat{\mu}} - \hat{\phi}_{\vec{n}})^2 \right) + V(\vec{\phi})$$



- N_{bos} 個の整数 $\vec{n} = (n_1, n_2, \dots, n_{N_{\text{bos}}})$, $\phi_i(n_i) = -R + n_i a_{\text{dig}}$
- $Z(\beta) = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}} \simeq \sum_{\vec{n}^{(1)}, \dots, \vec{n}^{(K)}} \langle \vec{n}^{(1)} | e^{-\Delta \hat{H}} | \vec{n}^{(2)} \rangle \langle \vec{n}^{(2)} | e^{-\Delta \hat{H}} | \vec{n}^{(3)} \rangle \dots \langle \vec{n}^{(K)} | e^{-\Delta \hat{H}} | \vec{n}^{(1)} \rangle$
- $\langle \vec{n}^{(j)} | e^{-\Delta \hat{H}} | \vec{n}^{(j+1)} \rangle \simeq \left\langle \vec{n}^{(j)} \left| \exp \left(-\Delta \sum_i \frac{\hat{\pi}_i^2}{2} \right) \right| \vec{n}^{(j+1)} \right\rangle \exp \left(-\Delta V(\vec{n}^{(j+1)}) \right)$
 - $\vec{n}^{(j)}, \vec{n}^{(j+1)}$ が何でも、 $1 - \frac{N_{\text{bos}} \Delta}{a_{\text{dig}}^2} > 0$ であれば非負.
- 符号問題のないMCMCが可能。

厳密な2点相関

2D (4×4 周期境界条件), 自由なスカラー場

$$V(\vec{\phi}) = \frac{m_{\text{lat}}^2}{2} \sum_{\vec{n}} \hat{\phi}_{\vec{n}}^2, m_{\text{lat}} = ma_{\text{lat}}, m^2 = 1, N_{\text{bos}} = 4^2 = 16$$

$$\hat{H}_{\text{lat}} = \sum_{\vec{n}} \left(\frac{1}{2} \hat{\pi}_{\vec{n}}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^{d=2} (\hat{\phi}_{\vec{n}+\hat{\mu}} - \hat{\phi}_{\vec{n}})^2 + \frac{m_{\text{lat}}^2}{2} \hat{\phi}_{\vec{n}}^2 \right) = \sum_{\vec{q}} \left(\frac{1}{2} \hat{\pi}_{\vec{q}} \hat{\pi}_{-\vec{q}} + \frac{\omega_{\text{lat},\vec{q}}^2}{2} \hat{\phi}_{\vec{q}} \hat{\phi}_{-\vec{q}} \right)$$

$$\text{with } \omega_{\text{lat},\vec{q}}^2 = m_{\text{lat}}^2 + 4 \sum_{\mu=1}^d \sin^2 \left(\frac{q_{\mu}}{2} \right).$$

$\Delta \rightarrow 0, R \rightarrow \infty, a_{\text{dig}} \rightarrow 0$ で期待される値

$$T \rightarrow 0: \text{ 零点振動 } \langle \hat{\phi}_{\vec{q}} \hat{\phi}_{-\vec{q}} \rangle = \frac{1}{2\omega_{\text{lat},\vec{q}}}$$

$$\text{有限の } T = \frac{1}{\beta}: \langle \hat{\phi}_{\vec{q}} \hat{\phi}_{-\vec{q}} \rangle = \frac{1}{2\omega_{\text{lat},\vec{q}} \tanh \frac{\beta\omega_{\text{lat},\vec{q}}}{2}}$$

我々の計算: $\Lambda = 2001 < 2^{11}, \beta = 1$, 最大のクラスターサイズ $B = K/2$

(a_{dig}, Δ) は $\frac{\Delta}{a_{\text{dig}}^2} \leq 0.01$ ($\frac{N_{\text{bos}}\Delta}{a_{\text{dig}}^2} \leq 0.16$) となるように選択した。

例2: 2次元自由スカラー一場

$$V(\vec{\phi}) = \frac{m_{\text{lat}}^2}{2} \sum_{\vec{n}} \hat{\phi}_{\vec{n}}^2, m_{\text{lat}} = ma_{\text{lat}}, m^2 = 1, N_{\text{bos}} = 4^2 = 16$$

$\Delta \rightarrow 0, R \rightarrow \infty, a_{\text{dig}} \rightarrow 0$ で期待される値

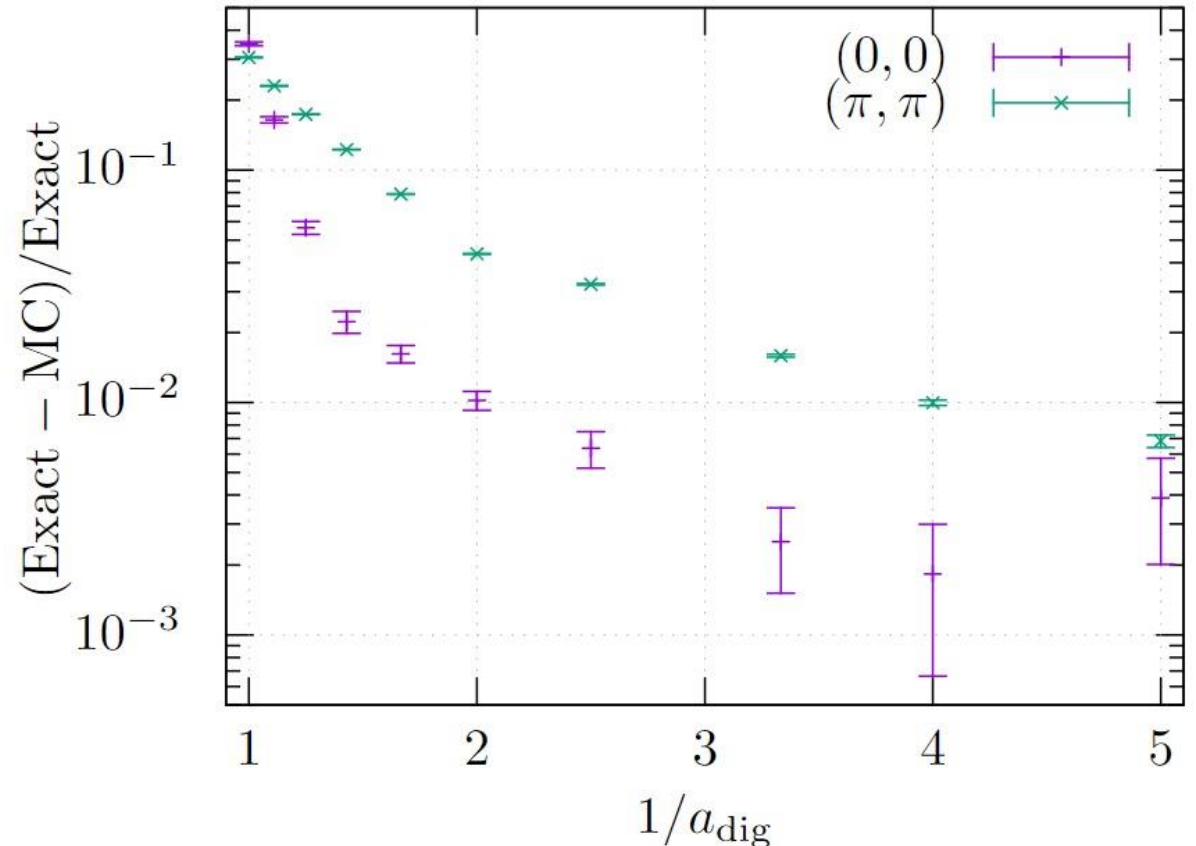
$$\text{有限の } T: \langle \hat{\phi}_{\vec{q}} \hat{\phi}_{-\vec{q}} \rangle = \frac{1}{2\omega_{\text{lat},\vec{q}} \tanh \frac{\beta\omega_{\text{lat},\vec{q}}}{2}}$$

シミュレーション結果

a_{dig}	Δ	$K = \beta/\Delta$	$\vec{q} = (0, 0)$	$\vec{q} = (\pi, \pi)$
0.20	0.0008	1250	1.0778(20)	0.18288(8)
0.25	0.00125	800	1.0800(13)	0.18230(5)
0.30	0.0015	667	1.0793(11)	0.18120(4)
0.40	0.002	500	1.0751(12)	0.17819(4)
0.50	0.002	500	1.0709(10)	0.17611(3)
0.60	0.005	200	1.0645(15)	0.16961(4)
0.70	0.005	200	1.0579(26)	0.16156(6)
0.80	0.005	200	1.0208(39)	0.15214(10)
0.90	0.005	200	0.9039(55)	0.14167(17)
1.00	0.005	200	0.7038(70)	0.12792(25)

我々の計算: $\Lambda = 2001, \beta = 1,$
最大のクラスタサイズ $B = K/2$

(a_{dig}, Δ) は $\frac{\Delta}{a_{\text{dig}}^2} \leq 0.01$ となるよう選択



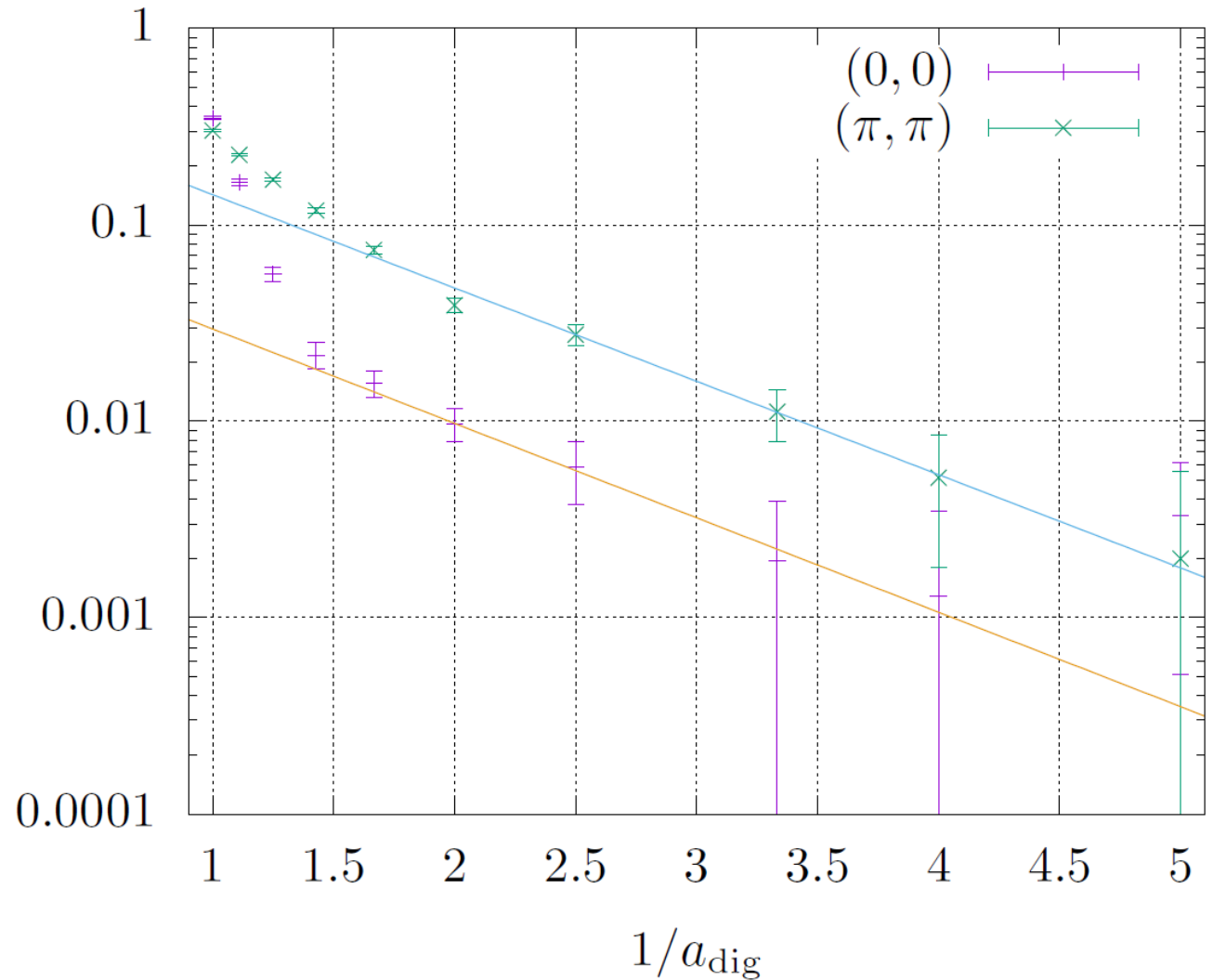
厳密な値を知らない場合？

$$\langle \hat{\phi}_{\vec{q}} \hat{\phi}_{-\vec{q}} \rangle = A e^{-\frac{B}{a_{\text{dig}}}} + C$$

として、 A, B, C に関して fit

\vec{q}	(0,0)	(π, π)
厳密値	1.0819	0.1841
Fit 結果	1.0814(10)	0.18324(10)

(Fit - MC) / Fit



まとめ

- ボソン系の量子計算を念頭に、場の値の離散化の効果を評価
- 古典計算機で**Markov-Chain Monte Carlo 計算**
 - 離散化した場の値 = a_{dig} の整数倍, **カットオフ R 以内**
 - **符号問題のない、効率的なサンプリング**
- デモンストレーション：
 - **1個の非調和振動子 (\rightarrow)**
 - **2次元格子上的自由スカラー場**
- a_{dig} が小さくなるとともに**指数関数的なエラー減衰**
 - **カットオフ R が小さい場合の計算も容易**
 - **行列モデルなども同様に計算可能**

