実施項目8: 量子・HPC連携アプリケーションの 研究開発と有効性の検証

物性物理学、量子化学、素粒子・原子核物理学などを中心とした量子多体系に対する量子 アルゴリズムを開発し、本事業で構築された量子・スパコン連携プラットフォームを用い て古典計算可能限界を超えた量子計算を少なくとも1つのアプリケーションで実現する。

2024年度量子・スパコン連携プラットフォームプロジェクトシンポジウム



量子・HPC連携ソフトフェアの構成と研究事業項目との対応



量子・HPC連携ソフトウェアの構成と研究事業項目との対応 义 5.



(1)量子ダイナミックス (2)量子熱力学計算 (3) 量子変分法に基づく量子最適化問題 (4)量子変分法を超えた量子最適化問題 (5)量子埋め込み法に基づく量子状態計算 (6)量子選択配置相互作用法による低エネルギー状態計算

量子・HPC連携アプリケーション

(1)量子ダイナミックス (2)量子熱力学計算 (3) 量子変分法に基づく量子最適化問題 (4)量子変分法を超えた量子最適化問題 (5)量子埋め込み法に基づく量子状態計算

量子・HPC連携アプリケーション

- (6)量子選択配置相互作用法による低エネルギー状態計算

← 先ほどの講演で詳しく報告

(1)量子ダイナミックス (2)量子熱力学計算 (3) 量子変分法に基づく量子最適化問題 (4)量子変分法を超えた量子最適化問題 (5)量子埋め込み法に基づく量子状態計算 (6)量子選択配置相互作用法による低エネルギー状態計算

量子・HPC連携アプリケーション

IBM QCによるkicked Ising模型の量子ダイナミックス

Kicked Ising model on 2D heavy-hex lattice

$$\begin{split} |\Psi(n)\rangle &= (U_F)^n |\Psi(0)\rangle \qquad n = t/T \\ \hat{U}_F &= \begin{bmatrix} \prod_i R_{Z_i}(\theta_Z) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \prod_i R_{Z_iZ_j}(\theta_J) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \prod_i R_{X_i}(\theta_X) \end{bmatrix} \qquad |\Psi(0)\rangle = \{\bigcirc = |0\rangle \bullet \\ \hat{R}_{X_i}(\theta_X) &= \exp(-i\theta_X X_i/2) \\ R_{Z_i}(\theta_Z) &= \exp(-i\theta_Z Z_i/2) \\ \hat{R}_{Z_iZ_j}(\theta_Z) &= \exp(-i\theta_J Z_iZ_j/2) \\ \theta_J &= -\pi/2 \qquad \langle Z_{avg}(t)\rangle = \frac{1}{N_A} \sum_{i \in A} \langle Z_i(t)\rangle \end{split}$$

Error mitigation protocol

$$\langle Z_{\rm avg}(t) \rangle \approx \frac{\langle Z_{\rm avg}(t) \rangle_0}{|\langle Z_{\rm avg}(t) \rangle_0|_{\theta_x} = \pi, \theta_z} \xrightarrow{(0.5 + 1.0)}{(0.5 + 1.0)} \frac{(\theta_x, \theta_z) = (0.8\pi, 0.5\pi)}{(0.5 + 1.0)}$$

K. Shinjo, K. Seki, T. Shirakawa, R.-Y. Sun, and S. Yunoki, arXiv:2403.16718



2dTNS: two-dimensional tensor network state method



IBM QCによるkicked Ising模型の量子ダイナミックス



定





(1)量子ダイナミックス (2)量子熱力学計算 (3) 量子変分法に基づく量子最適化問題 (4)量子変分法を超えた量子最適化問題 (5)量子埋め込み法に基づく量子状態計算 (6)量子選択配置相互作用法による低エネルギー状態計算

量子・HPC連携アプリケーション

Quantinuum QCによるミクロカノニカル計算

状態密度:

 $g(E) = \frac{1}{d} \sum_{n=0}^{d-1} \delta(E - E_n) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \left(\frac{1}{d} \operatorname{Tr} \left[e^{-i\mathcal{H}t} \right] \right) e^{iEt}$

状態密度を計算したい →時間発展演算子のトレースを計算したい $\rightarrow \langle \psi | e^{-i\mathcal{H}t} | \psi \rangle \approx Tr[e^{-i\mathcal{H}t}]/d となる状態|\psi\rangle を準備したい$

孤立系を時間周期的なハミルトニアンで駆動すると 最終的に熱化する(温度無限大の状態になる)現象

本研究のポイント: 'Floquet 熱化現象を模して、上記の $|\psi
angle$ を準備する $|\psi\rangle$ をミクロカノニカル計算に応用する 上記をイオントラップ実機(H1-1, H1-2)を用いて行う

K. Seki, Y. Kikuchi, T. Hayata, and S. Yunoki, arXiv:2405.07613

FT[時間発展演算子のトレース]



その場合中辺のデルタ関数に($\sim 1/\tau$ の)幅が付く 詳細は、K. Seki & Yunoki, PRB 106, 155111 (2022)

近似的な状態*t*-design (*t* ≥ 2), スクランブリング状態



Floquet量子回路: 1D kicked Ising 模型



• Hayden-Preskill 復元プロトコル • 2*t*-点 非時間順序相関関数 (OTOCs)

非時間順序相関関数(OTOCs)



H1-2 で実行
N + 1 = 20 量子ビットを利用
データ点あたり500ショット
駆動周期パラメータ JT = π/2 固定
演算子X_n(m)の場所nと時間ステップmを変えながら計算



- 演算子 $Z_1 \ge X_n(m)$ が重ならない場合状況 (m < n 1)ではOTOC ≈ 1 (厳密な結果はOTOC=1)
- ・時間ステップがm ≳ nのダイナミクス末期ではHaar randomの場合に期待 される値(0)に近づく
- エラー緩和により、特に $m \sim n$ (ライトコーン先端付近) で厳密な結果 との一致が改善される。一方で $m \gtrsim n$ では統計誤差の増加が際立つ。



ミクロカノニカル計算

状態密度

改変後の状態密度

デルタ関数の和 →幅~ σのガウシアンの和

$$\mathcal{H} = \frac{J}{2} \sum_{i=1}^{N} (X_i X_{i+1} + Y_i Y_{i+1})$$
$$\sigma = \frac{\sigma_{\mathcal{H}}}{\sqrt{2\pi}}, \ \sigma_H^2 := \frac{1}{d} \operatorname{Tr}[\mathcal{H}^2] - \frac{1}{d} \operatorname{Tr}[\mathcal{H}^2]$$



FT[時間発展演算子のトレース]

 $g(E) = \frac{1}{d} \sum_{n=0}^{d-1} \delta(E - E_n) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \left(\frac{1}{d} \operatorname{Tr}\left[e^{-i\mathcal{H}t}\right]\right) e^{iEt}$



無限に時間発展はできないので、ガウシアンを使って 発展時間に~1/σのカットオフを入れた量を考える

 $g_{\sigma}(E) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}d} \sum_{n=0}^{d-1} e^{-\frac{(E-E_n)^2}{2\sigma^2}} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\frac{t^2\sigma^2}{2}} \left(\frac{1}{d} \operatorname{Tr}\left[e^{-i\mathcal{H}t}\right]\right) e^{iEt}$

 $_{1} + Z_{i}Z_{i+1} + I_{i}I_{i+1}$), N = 16, 周期境界条件 $-\left(\frac{1}{d}\operatorname{Tr}[\mathcal{H}]\right)^{2} と \texttt{tas}$

ミクロカノニカル計算



$$\mathcal{L}_{O}(t) = \frac{1}{|M||R|} \sum_{m \in M} \sum_{r \in R} \mathcal{L}_{O,m,r}(t)$$
$$D_{O}(E) = \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-\frac{t^{2}\sigma^{2}}{2}} \mathcal{L}_{O}(t) e^{iEt}$$
$$\langle O \rangle(E) = \frac{D_{O}(E)}{D_{I}(E)}$$

•H1-2で実行 • N + 1 = 17 量子ビットを利用 • $M = \{8, 16\}, R = \{1, 2, 3, 4\}$ •駆動周期パラメータ $T = \pi/2$ 固定 • データ点あたり800ショット



-Trotter, 1 Trotter ス

- $|t| \leq \sigma^{-1}$ におけるLoschmidt振幅 $\mathcal{L}_O(t)$ がミクロカノニカル期待 値に主に寄与する • $\langle Z_1 Z_2 \rangle (E)$ は状態密度の大きいエネルギーの範囲 $(E_{\infty} - \sigma_{\mathcal{H}} \lesssim E_{\infty})$ $E \leq E_{\infty} + \sigma_{\mathcal{H}}$) で厳密な結果と良い一致 • $\langle O \rangle(E)$ の統計誤差~ $\frac{1}{\sqrt{N_{\text{shots}}D_I(E)}} = \frac{1}{\sqrt{N_{\text{shots}}}} \frac{2^N}{e^{S(E)}}$, ここでS(E) = 1 2^N
 - $ln2^{N}D_{I}(E)$ エントロピー:指数関数的なショット数が必要



中間目標に関する評価基準:

で実行しその結果を確認する。

最終目標に関する評価基準:

- ■本事業で開発される量子・スパコン連携プラットフォームを用いて古典計算可能領域を超えた計算を1つ以上実現する。

量子・HPC連携アプリケーション

■ 量子ダイナミックス計算を含めた量子多体系に対する量子アルゴリズム3つ以上を本事業で開発される量子・スパコン連携プラットフォーム上

■本事業で開発される量子・スパコン連携プラットフォームを用いて量子多体系の低エネルギー状態計算を可能とする。

