

素粒子シミュレーションへの 量子コンピュータ応用

飯山悠太郎（東大ICEPP）

新テラスケール研究会 [2020年8月12日]

量子コンピュータ(QC)とHEPシミュレーション

使い道、アプローチは複数：

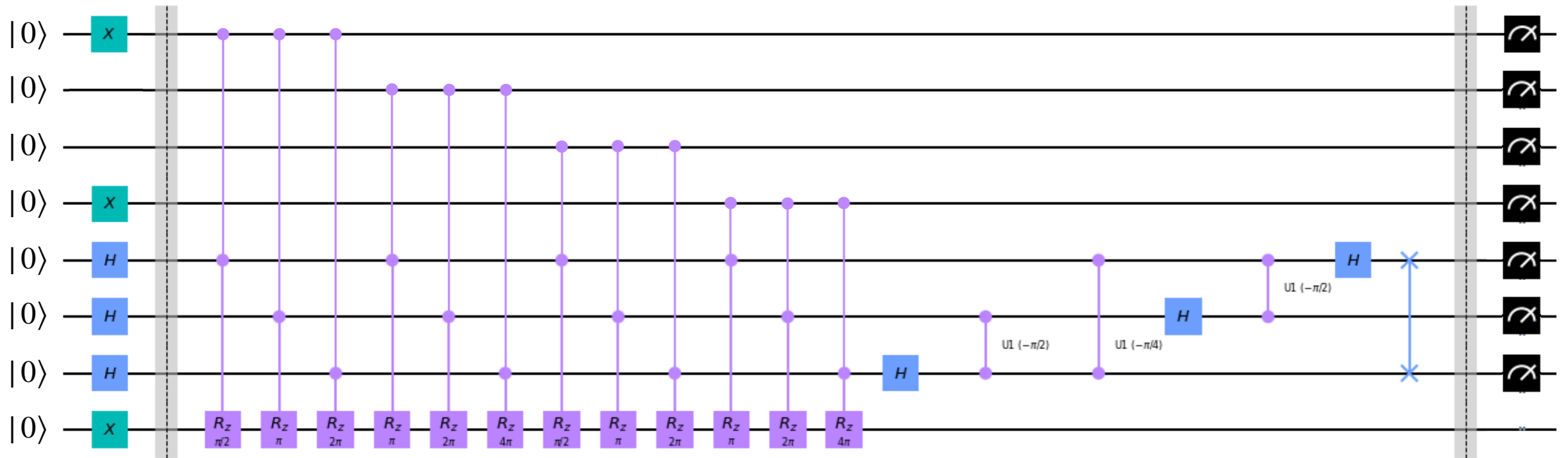
- 「HEP = 量子現象。QCと相性がいい」
 - ▶ 場の理論の第一原理計算
 - ▶ 干渉効果を入れたシミュレーション
- 「QC = 巨大な並列計算機 + 乱数発生機。MCに使える」
 - ▶ 欲しい確率分布を並列計算してサンプリング
- 他にもまだまだあるはず

※量子ビットを使う「ゲート型」 a.k.a. 「デジタル」 QCの議論に絞ります

QCの仕組み

例：1+2を計算する

※量子ビットを下から上に順序づけている

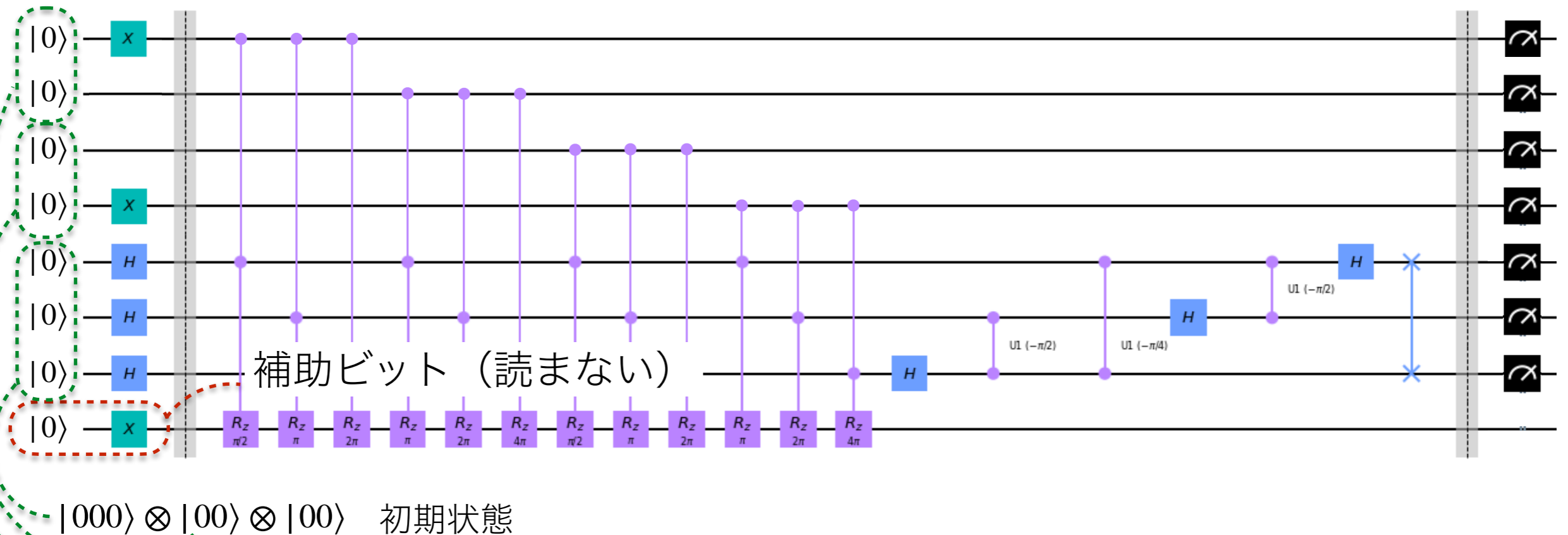


$|000\rangle \otimes |00\rangle \otimes |00\rangle$ 初期状態

QCの仕組み

例：1+2を計算する

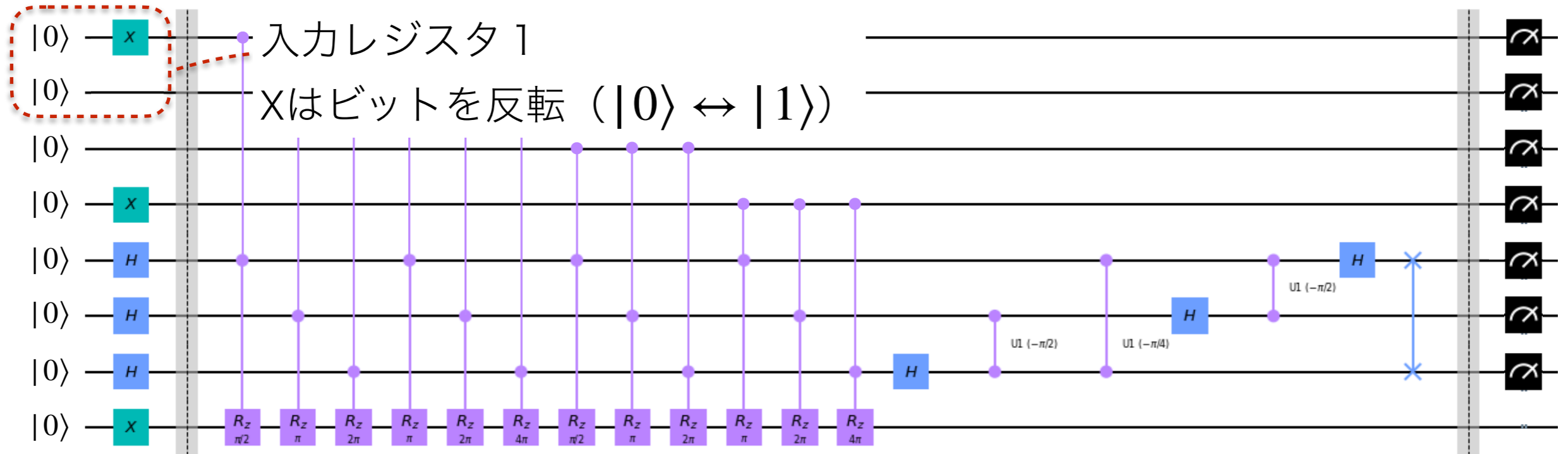
※量子ビットを下から上に順序づけている



QCの仕組み

例：1+2を計算する

※量子ビットを下から上に順序づけている



$$|000\rangle \otimes |00\rangle \otimes |00\rangle$$

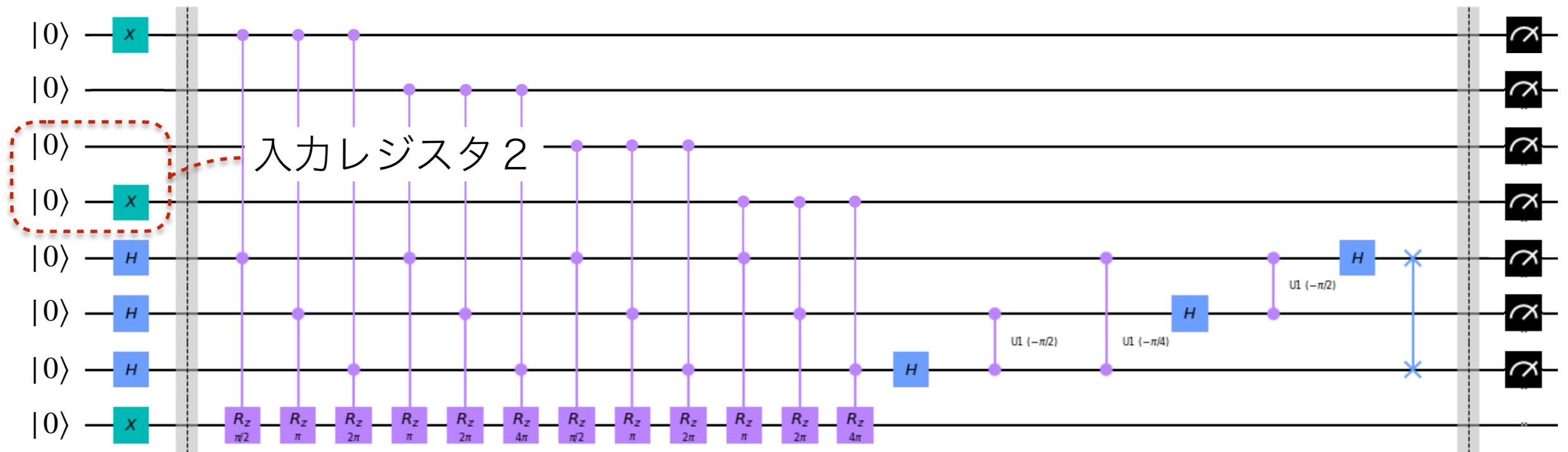


$$|000\rangle \otimes |00\rangle \otimes |01\rangle \quad \text{下一桁が反転：}|1\rangle$$

QCの仕組み

例：1+2を計算する

※量子ビットを下から上に順序づけている



$$|000\rangle \otimes |00\rangle \otimes |00\rangle$$

$$\downarrow$$

$$|000\rangle \otimes |00\rangle \otimes |01\rangle$$

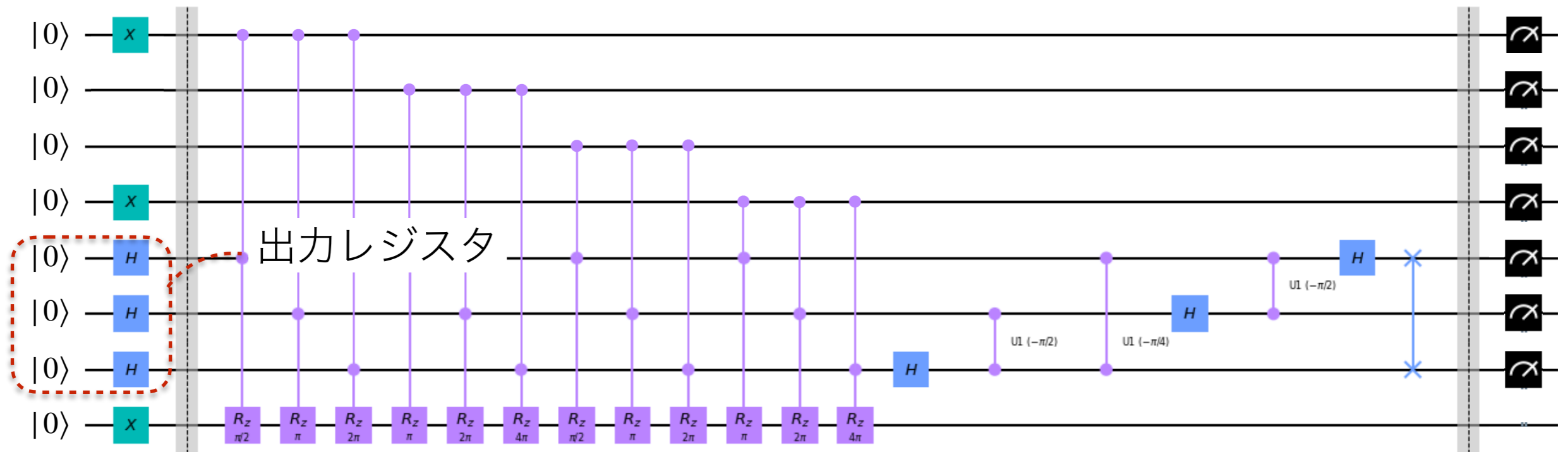
$$\downarrow$$

$$|000\rangle \otimes |10\rangle \otimes |01\rangle \quad \text{上一桁が反転：}|2\rangle$$

QCの仕組み

例：1+2を計算する

※量子ビットを下から上に順序づけている

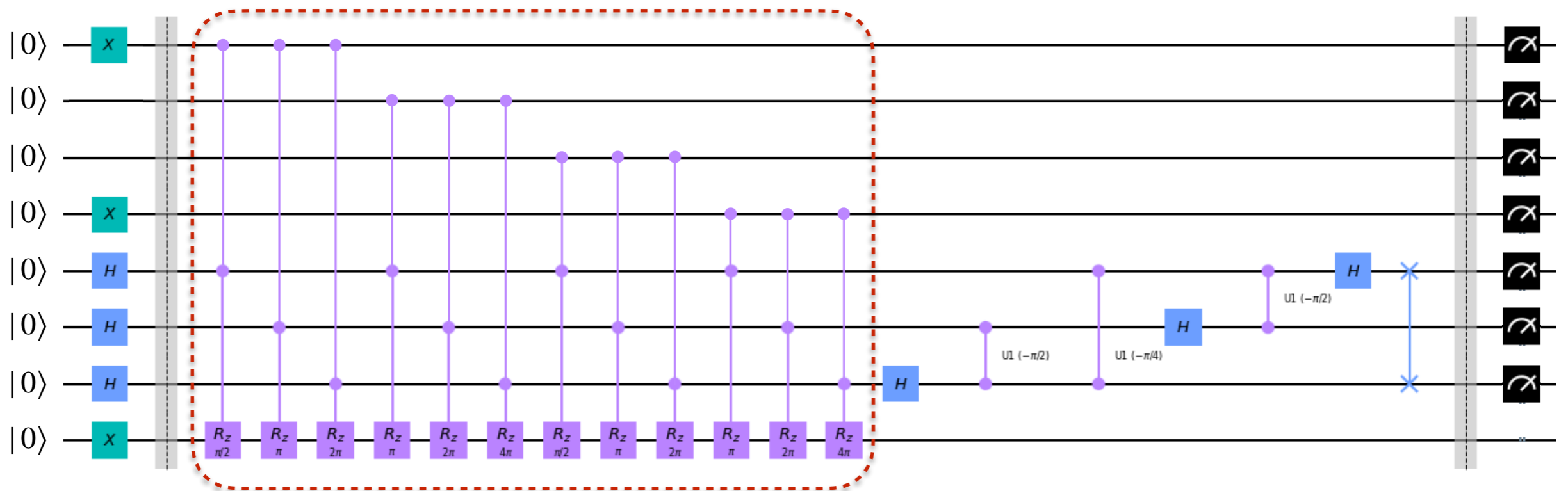


$$\begin{aligned}
 &|000\rangle \otimes |00\rangle \otimes |00\rangle \\
 &\quad \downarrow \\
 &|000\rangle \otimes |00\rangle \otimes |01\rangle \\
 &\quad \downarrow \\
 &|000\rangle \otimes |10\rangle \otimes |01\rangle \\
 &\quad \downarrow \\
 &\frac{1}{4} \sum_{k=0}^7 |k\rangle \otimes |10\rangle \otimes |01\rangle
 \end{aligned}$$

QCの仕組み

例：1+2を計算する

※量子ビットを下から上に順序づけている



$$|000\rangle \otimes |00\rangle \otimes |00\rangle$$

$$\downarrow$$

$$|000\rangle \otimes |00\rangle \otimes |01\rangle$$

$$\downarrow$$

$$|000\rangle \otimes |10\rangle \otimes |01\rangle$$

$$\downarrow$$

$$\frac{1}{4} \sum_{k=0}^7 |k\rangle \otimes |10\rangle \otimes |01\rangle$$

$$\downarrow$$

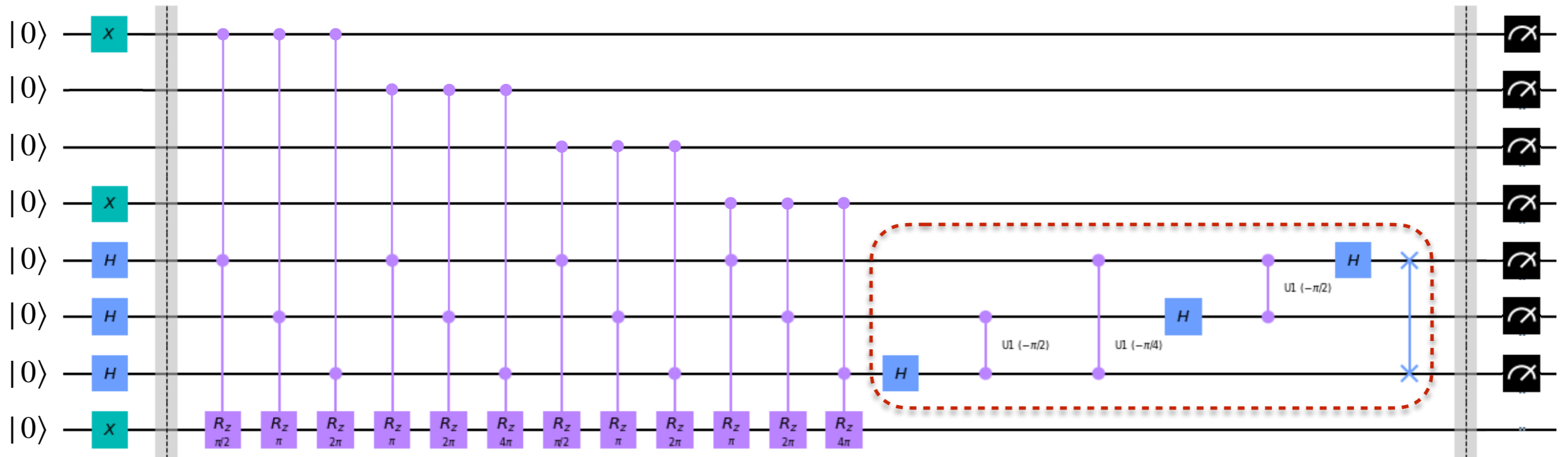
$$\frac{1}{4} \sum_{k=0}^7 \exp\left(\frac{2\pi i}{8} 3k\right) |k\rangle \otimes |10\rangle \otimes |01\rangle$$

出力レジスタの各基底に入力に応じた位相がかかる

QCの仕組み

例：1+2を計算する

※量子ビットを下から上に順序づけている



逆フーリエ変換

$$\sum_{k=0}^{2^n-1} \exp\left(\frac{2\pi i}{2^n} jk\right) |k\rangle \xrightarrow{\text{I.F.T.}} |j\rangle$$

$$|000\rangle \otimes |00\rangle \otimes |00\rangle$$

$$\downarrow$$

$$|000\rangle \otimes |00\rangle \otimes |01\rangle$$

$$\downarrow$$

$$|000\rangle \otimes |10\rangle \otimes |01\rangle$$

$$\downarrow$$

$$\frac{1}{4} \sum_{k=0}^7 |k\rangle \otimes |10\rangle \otimes |01\rangle$$

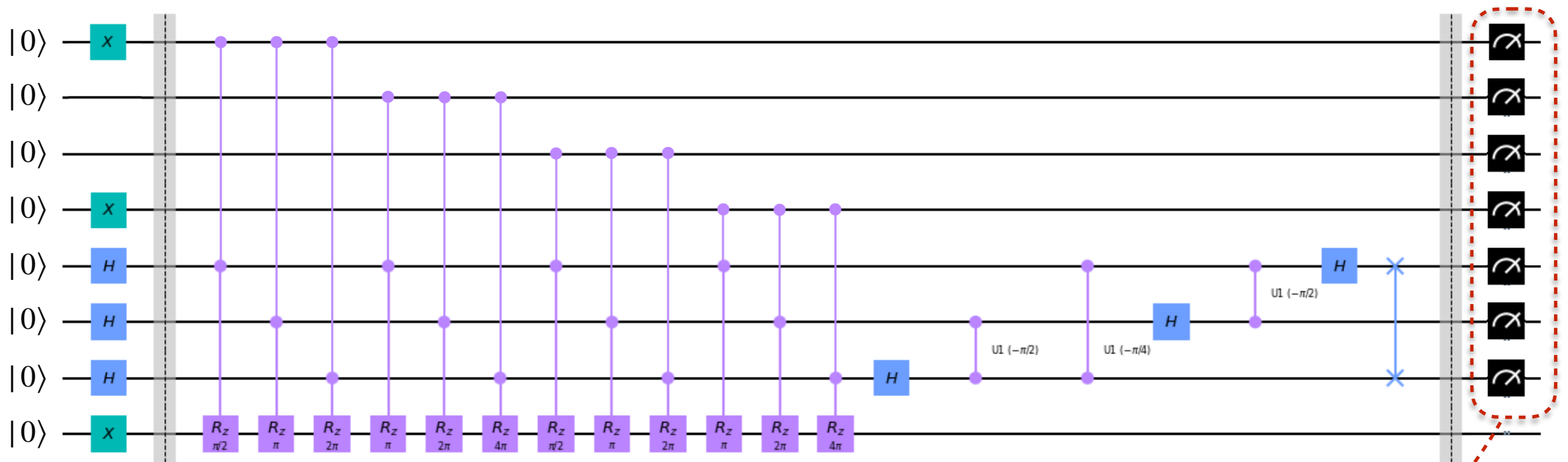
$$\downarrow$$

$$\frac{1}{4} \sum_{k=0}^7 \exp\left(\frac{2\pi i}{8} 3k\right) |k\rangle \otimes |10\rangle \otimes |01\rangle \rightarrow |011\rangle \otimes |10\rangle \otimes |01\rangle$$

QCの仕組み

例：1+2を計算する

※量子ビットを下から上に順序づけている



$$|000\rangle \otimes |00\rangle \otimes |00\rangle$$

$$\downarrow$$

$$|000\rangle \otimes |00\rangle \otimes |01\rangle$$

$$\downarrow$$

$$|000\rangle \otimes |10\rangle \otimes |01\rangle$$

$$\downarrow$$

$$\frac{1}{4} \sum_{k=0}^7 |k\rangle \otimes |10\rangle \otimes |01\rangle$$

$$\frac{1}{4} \sum_{k=0}^7 \exp\left(\frac{2\pi i}{8} 3k\right) |k\rangle \otimes |10\rangle \otimes |01\rangle \rightarrow |011\rangle \otimes |10\rangle \otimes |01\rangle$$

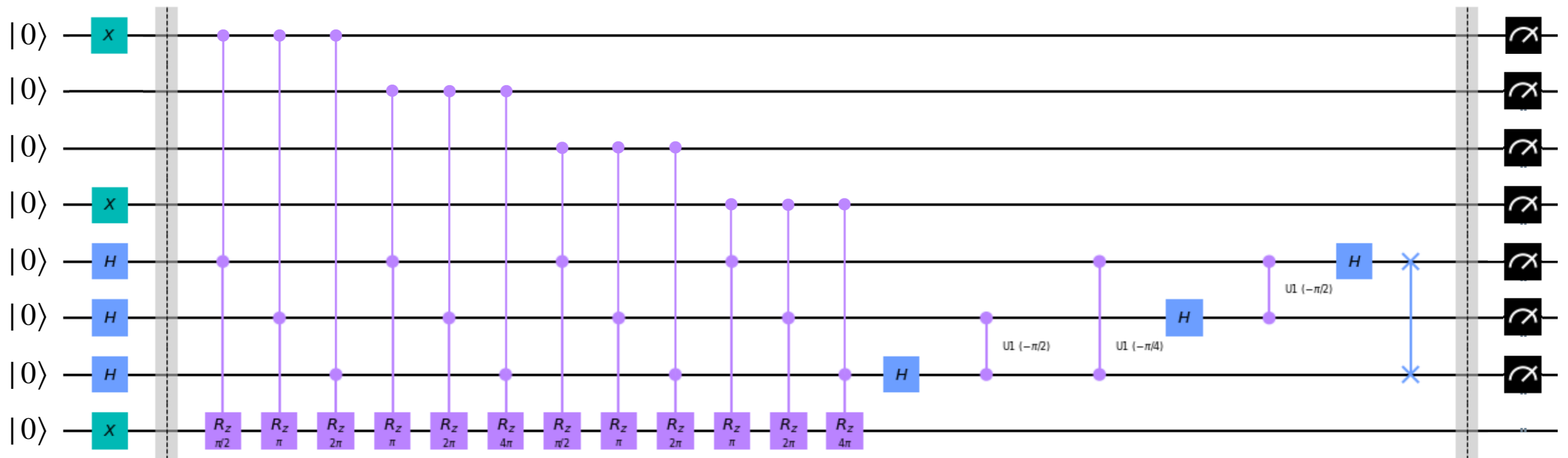
測定結果：ビット列 011 10 01

$$3 = 2 + 1$$

QCの仕組み

例：1+2を計算する

※量子ビットを下から上に順序づけている



$$\begin{aligned}
 &|000\rangle \otimes |00\rangle \otimes |00\rangle \\
 &\quad \downarrow \\
 &|011\rangle \otimes |10\rangle \otimes |01\rangle
 \end{aligned}$$

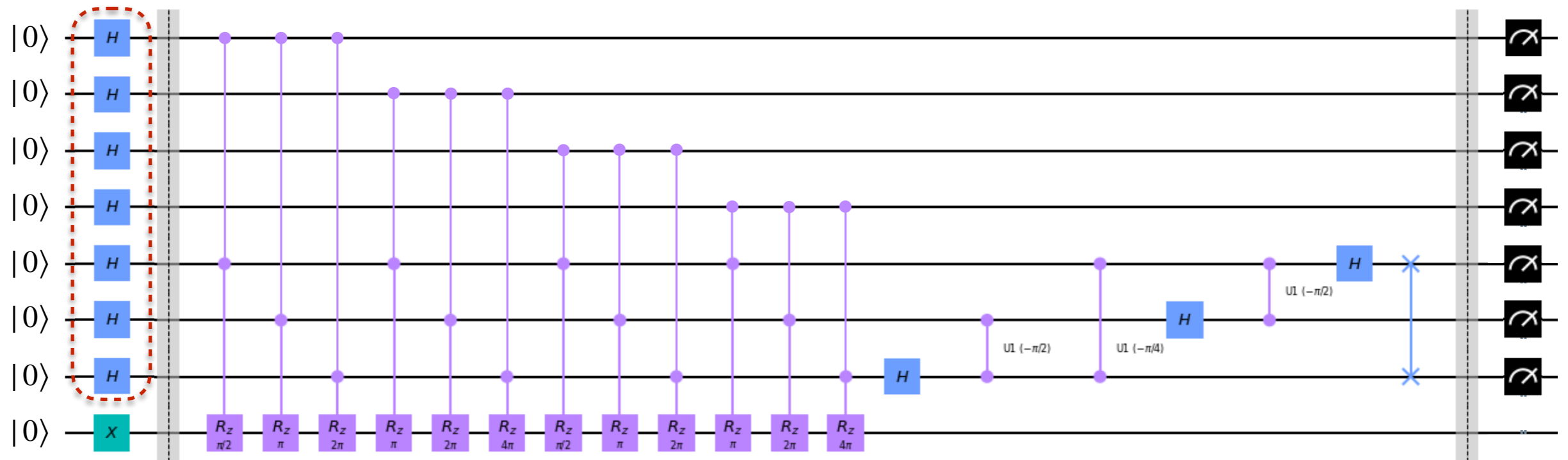
Remarks:

- QCでの計算は位相回転などユニタリ変換の積み重ね
→結構回りくどい
- デジタルコンピュータなので、計算はあくまでビット列の操作
→古典計算機と同じ
- 計算結果は終状態を0/1基底で測定して得る

“Extreme SIMD machine”

* SIMD = Single instruction, multiple data

例：{0,1,2,3}+{0,1,2,3} (16個の足し算)を並列計算する



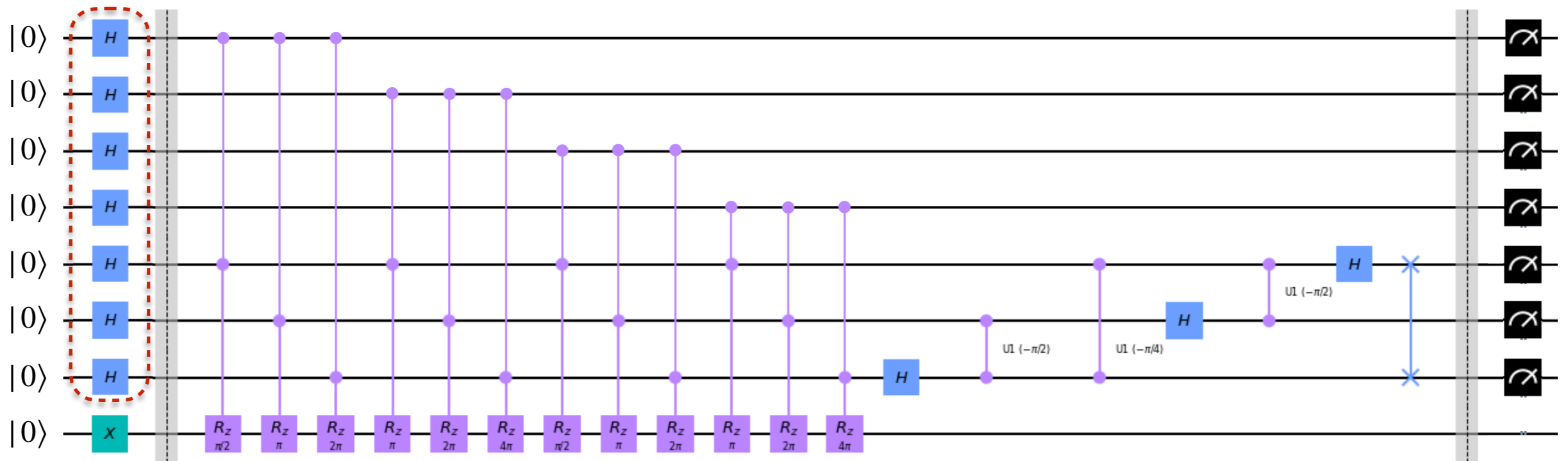
{0,1,2,3}×{0,1,2,3} 重ね合わせで始める

$$\frac{1}{4} \sum_{k=0}^3 \frac{1}{2} \sum_{m=0}^3 \frac{1}{2} \sum_{n=0}^3 |k\rangle \otimes |m\rangle \otimes |n\rangle$$

“Extreme SIMD machine”

* SIMD = Single instruction, multiple data

例：{0,1,2,3}+{0,1,2,3} (16個の足し算)を並列計算する



{0,1,2,3}×{0,1,2,3} 重ね合わせで始める

$$\frac{1}{4} \sum_{k=0}^3 \frac{1}{2} \sum_{m=0}^3 \frac{1}{2} \sum_{n=0}^3 |k\rangle \otimes |m\rangle \otimes |n\rangle$$

計算部分は全く同じ回路

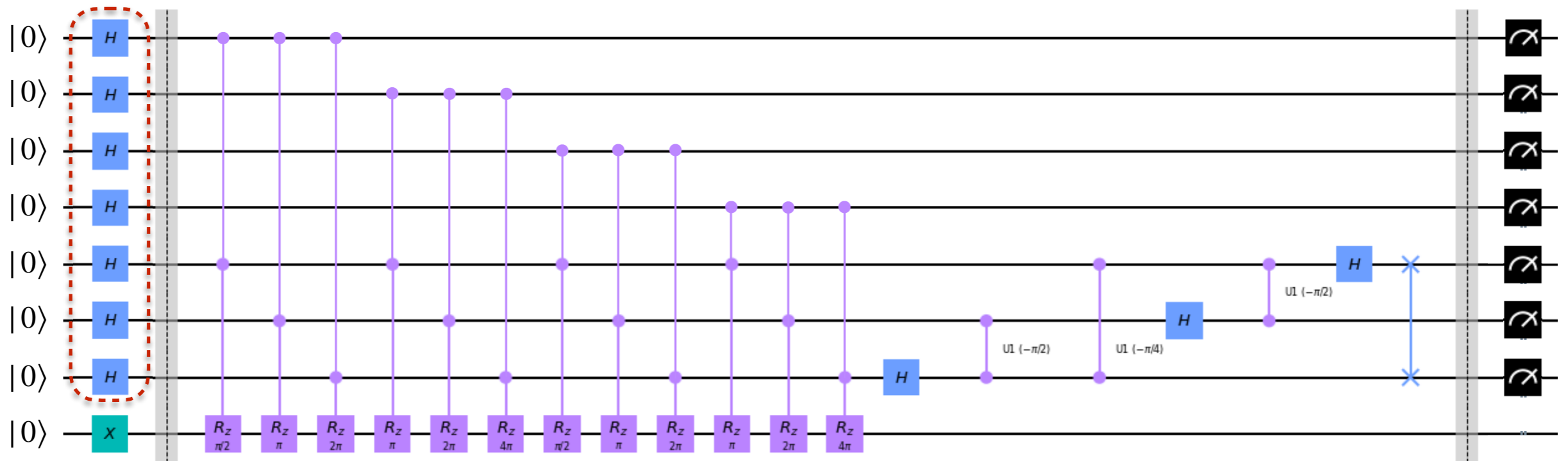
各m, nの組み合わせに対して答えが出る

$$\frac{1}{2} \sum_{m=0}^3 \frac{1}{2} \sum_{n=0}^3 |m+n\rangle \otimes |m\rangle \otimes |n\rangle$$

“Extreme SIMD machine”

* SIMD = Single instruction, multiple data

例：{0,1,2,3}+{0,1,2,3} (16個の足し算)を並列計算する



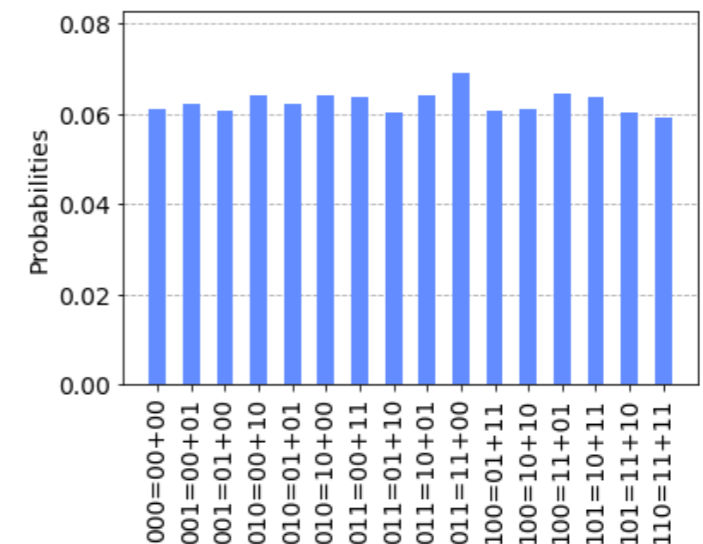
10000回計算+測定(shot)を実行し
ヒストグラムを得ると：

{0,1,2,3}×{0,1,2,3} 重ね合わせで始める

$$\frac{1}{4} \sum_{k=0}^3 \frac{1}{2} \sum_{m=0}^3 \frac{1}{2} \sum_{n=0}^3 |k\rangle \otimes |m\rangle \otimes |n\rangle$$

計算部分は全く同じ回路
各m, nの組み合わせに対して答えが出る

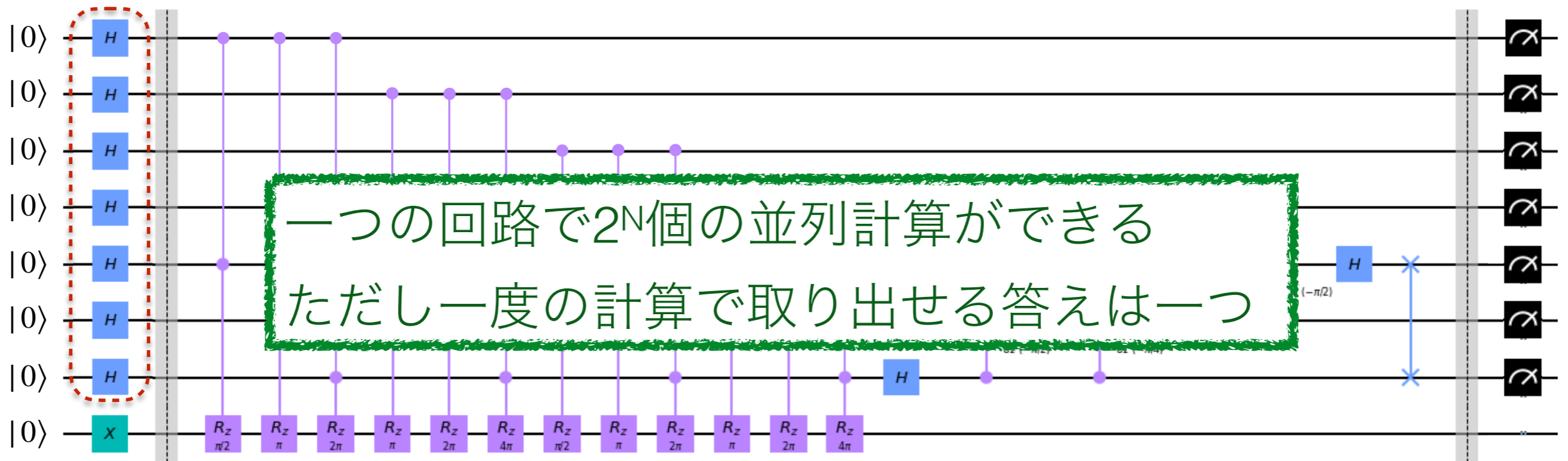
$$\frac{1}{2} \sum_{m=0}^3 \frac{1}{2} \sum_{n=0}^3 |m+n\rangle \otimes |m\rangle \otimes |n\rangle$$



“Extreme SIMD machine”

* SIMD = Single instruction, multiple data

例：{0,1,2,3}+{0,1,2,3} (16個の足し算)を並列計算する



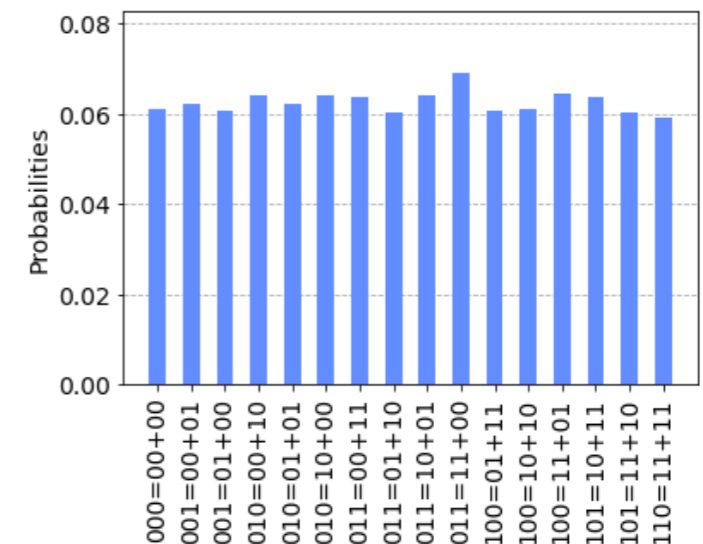
10000回計算+測定(shot)を実行し
ヒストグラムを得ると：

{0,1,2,3}×{0,1,2,3} 重ね合わせで始める

$$\frac{1}{4} \sum_{k=0}^3 \frac{1}{2} \sum_{m=0}^3 \frac{1}{2} \sum_{n=0}^3 |k\rangle \otimes |m\rangle \otimes |n\rangle$$

計算部分は全く同じ回路
各m, nの組み合わせに対して答えが出る

$$\frac{1}{2} \sum_{m=0}^3 \frac{1}{2} \sum_{n=0}^3 |m+n\rangle \otimes |m\rangle \otimes |n\rangle$$



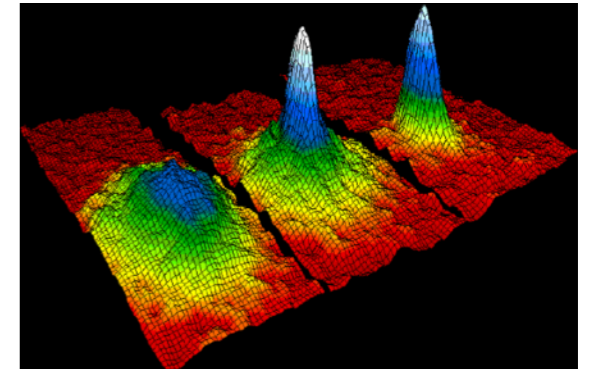
「量子現象とQCとの相性」 具体的に？

- デジタルコンピュータなので、量子現象をそのまま再現できるわけではない
 - 量子系をデジタルモデル化して、特定の観測量を計算する
→ 古典計算機でやることと同じ
- 強みは時間発展シミュレーション
 - Single instruction (Hamiltonian) multiple data (eigenstates)
 - 量子系のハミルトニアン H に関して $e^{-iH\Delta t}$ をゲートで表現し、 $\langle H \rangle \Delta t \ll 1$ の小さなステップを何度もかけていく
 - NB: $e^{-iH\Delta t}$ はユニタリ演算子

場の量子論 on QC

Jordan, Lee, & Preskill (Science June 2012)

- ϕ^4 理論のQCでのシミュレーション法を提唱
- d 次元空間を N^d の格子に切り分け、各格子点で ϕ の値を n 量子ビットで表現 (2^n 通りの値)
- 初期状態として離れた波束を用意し、時間発展
- 発展後に場の状態を測定
 - $N^d \times n$ のビット列から、終状態の粒子数や運動量を読み取る
- (いろいろと技術的な工夫があるが) 単純明快な手法
 - ただし必要な量子ビット数が多すぎ→今のQCでは実現不可能
 - HEPのシミュレーションに実用可能なレベルは将来的にも不可能?



MCジェネレータとしてのQC

ここまで紹介した例：QCで多数の時間発展経路を同時に検討

しかし、1 shotごとに得られるのは可能な終状態のうちの一つ

→ MCジェネレータとみなせばいい。shots = events

基本の枠組み：

- 量子ビット列と観測量を対応づける

Parton showerでの例

観測量：場の構成、終状態粒子群の運動量、etc.

001100101100
 $\underbrace{\hspace{1.5cm}}_{\phi} \quad \underbrace{\hspace{1.5cm}}_{f_1} \quad \underbrace{\hspace{1.5cm}}_{f_2} \quad \underbrace{\hspace{1.5cm}}_{f_1}$

- 各ビット列が正しい確率で得られるような量子状態を作る

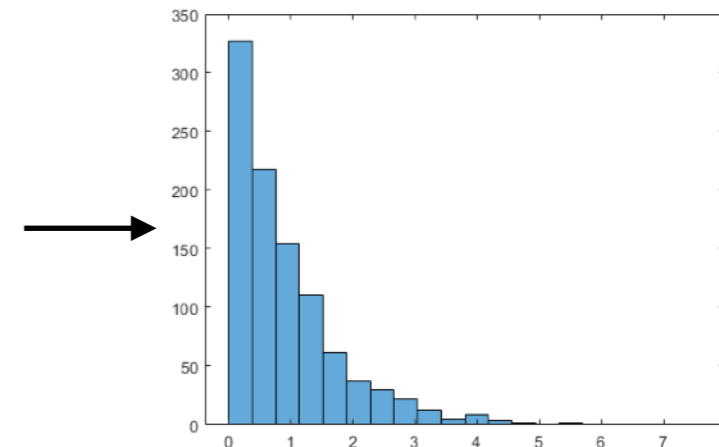
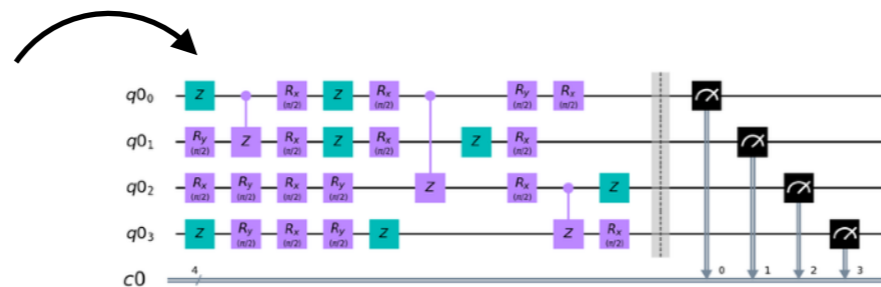
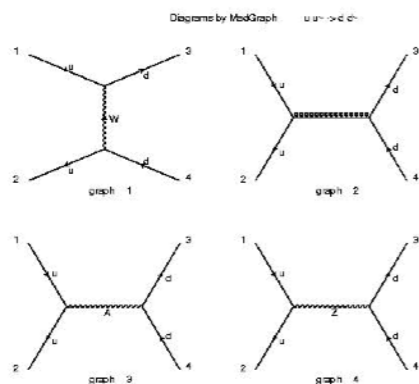
$|\text{final}\rangle = \sum_{k=0}^{2^n-1} \alpha_k |k\rangle \rightarrow$ ビット列 k が確率 $|\alpha_k|^2$ で出現

- 計算と測定を何度も繰り返す

時間発展にこだわらない

既存のイベントジェネレータをそのままQCに：

- 終状態の運動量空間を 2^n 個に区切る $\underbrace{001100111001001001}_{p_1^x} \dots$
- 既存のジェネレータが使う不変散乱振幅の計算式をQCに実装
量子状態 $\frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_k \mathcal{M}(k) |k\rangle$ を作る (Ω : normalization)
- 1 shot ごとにビット列 k が確率 $|\mathcal{M}(k)|^2/\Omega$ で出現
 k は特定の終状態運動量の組み合わせに対応する
→MCイベントジェネレータとなる



QC event generatorのモチベーション

- 現行のジェネレータ：イベント生成の前に位相空間積分が必要
- 積分の所要時間は終状態粒子数の指数関数的に増加
 - $W+8j$ @LOの積分：
 - スパコン1024ノード×23時間かけて統計精度4.68%
 - FCCでprecision QCD測定をするためのMCサンプルは作れるのか？

Timing and memory usage (Sherpa 3.x.y + HDF5)

LO ME level event generation only (Comix; $\gamma, Z, h, \mu, \nu_\mu, \tau, \nu_\tau$ off)

Process W^{++}	1j	2j	3j	4j
RAM Usage	21 MB	43 MB	48 MB	85 MB
Init/startup time	<1s / <1s	<1s / <1s	2s / <1s	32s / <1s
Integration time	8×4m26s	16×16m42s	32×20m26s	64×1h32m
MC uncertainty	0.22%	0.46%	0.89%	0.97%
Unweighting eff	$6.59 \cdot 10^{-3}$	$7.50 \cdot 10^{-4}$	$2.71 \cdot 10^{-4}$	$1.47 \cdot 10^{-4}$
10k evts	1m 2s	15m 5s	1h 3m	5h 56m

Numbers generated on dual 8-core Intel® Xeon® E5-2660 @ 2.20GHz

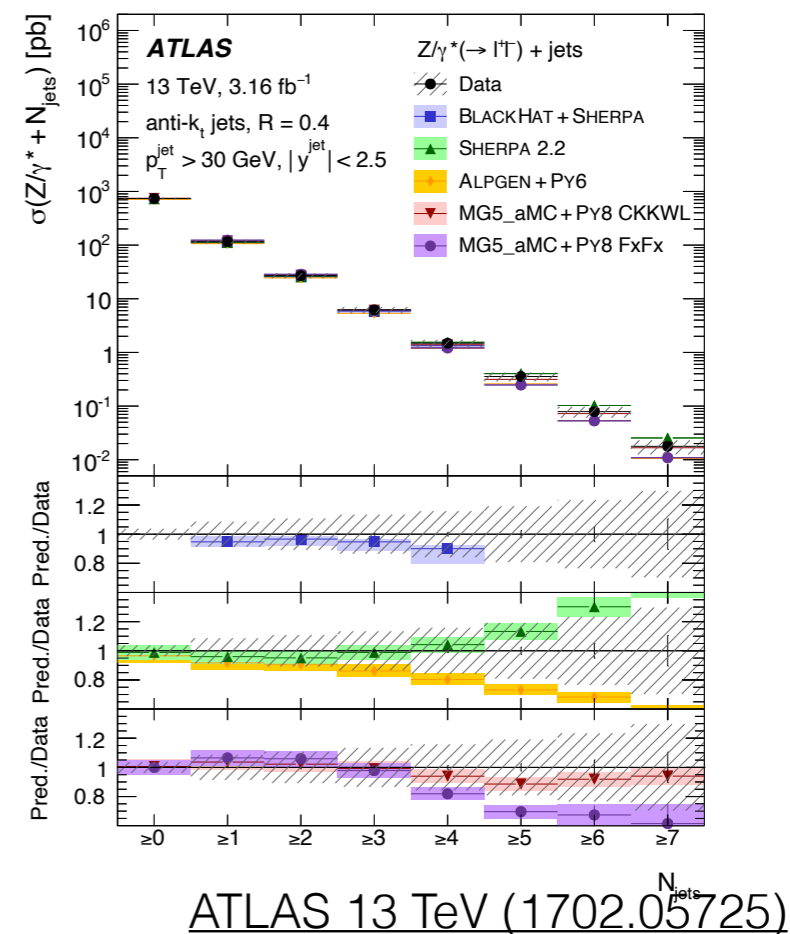
Process W^{++}	5j	6j*	7j*	8j†
RAM Usage	189 MB	484 MB	1.32 GB	1.32 GB
Init/startup time	3m5s / 1s	24m52s / 5s	3h6m / 18s	5h55m / 29s
Integration time	128×4h38m	256×13h53m	512×19h0m	1024×23h8m
MC uncertainty	1.0%	0.99%	2.38%	4.68%
Unweighting eff	$9.56 \cdot 10^{-5}$	$7.66 \cdot 10^{-5}$	$7.20 \cdot 10^{-5}$	$7.51 \cdot 10^{-5}$
10k evts	24h 40m	2d 11h	10d 15h	78d 1h

Numbers generated on dual 8-core Intel® Xeon® E5-2660 @ 2.20GHz

*:† Number of quarks limited to $\leq 6/4$

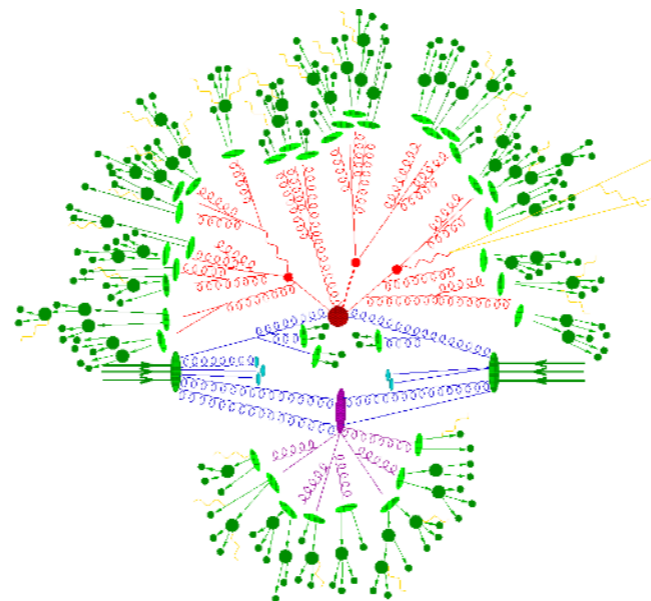
NERSC Cori (HPC)使用

H. Schulz 2018



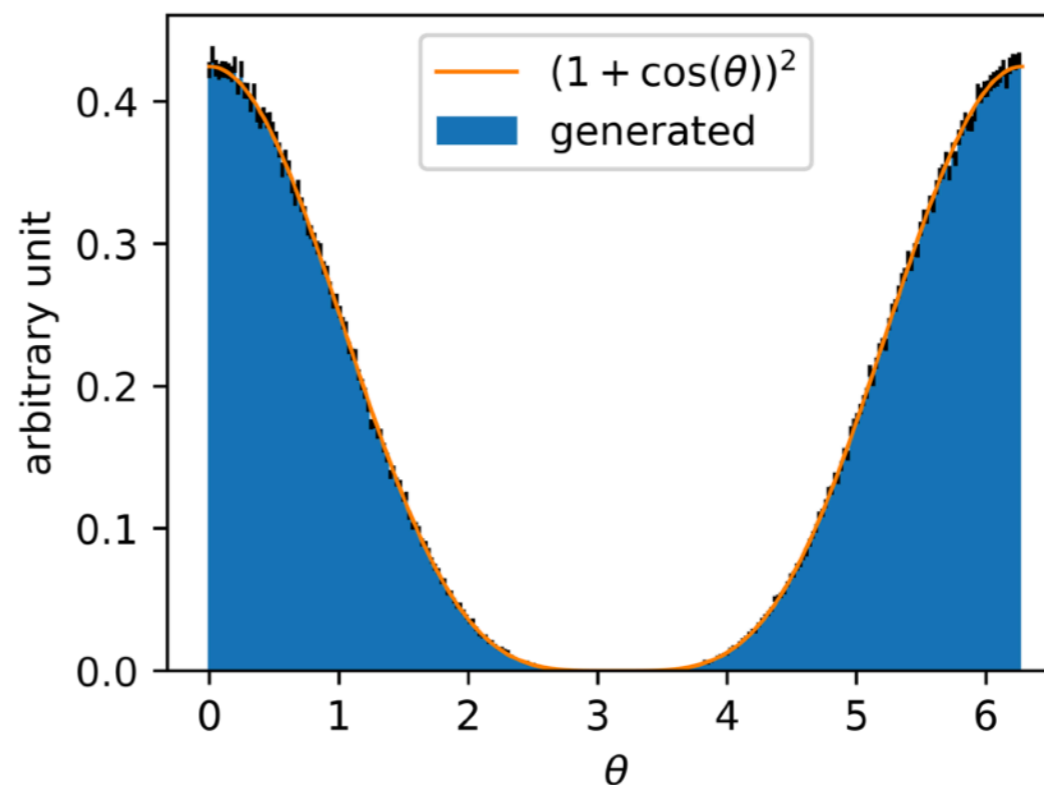
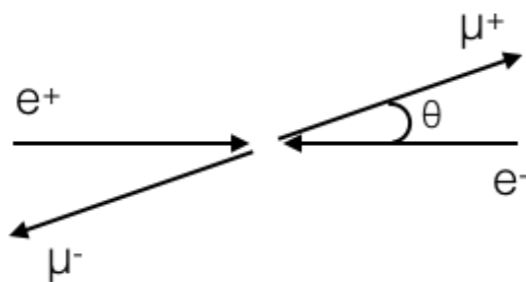
QC event generatorのモチベーション

- 積分が必要なのは正規化のため
- QCジェネレータは積分が不要
 - ユニタリティ→量子状態は常にノルムが1
 $1/\sqrt{\Omega} \sum_k \mathcal{M}(k) |k\rangle$ の計算で $1/\sqrt{\Omega}$ は勝手についてくる
- 終状態粒子数 \propto 量子ビット数
 - 粒子数を増やしても必要なリソースは高々多項式的に増加



最初の一歩

- $e^-_L e^+_R \rightarrow \mu^-_L \mu^+_R$ の不変振幅 $\mathcal{M} \propto (1 + \cos \theta)$
- \sqrt{s} が一定なら、終状態運動量は θ のみに依存
→ 8量子ビットで状態 $\frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{k=0}^{255} (1 + \cos \frac{2k\pi}{256}) |k\rangle$ を作る
- QCシミュレータで多数shot実行、 θ のヒストグラムを作る：



実用化にむけて

- 一般の散乱振幅は当然 $1 + \cos \theta$ ほど簡単ではない
 - $1 + \cos \theta$ は単純なビット操作+フーリエ変換で作れる
- 複雑な関数 $\mathcal{M}(\Phi)$ から状態 $\sum_k \mathcal{M}(\Phi_k) |k\rangle$ を作るには

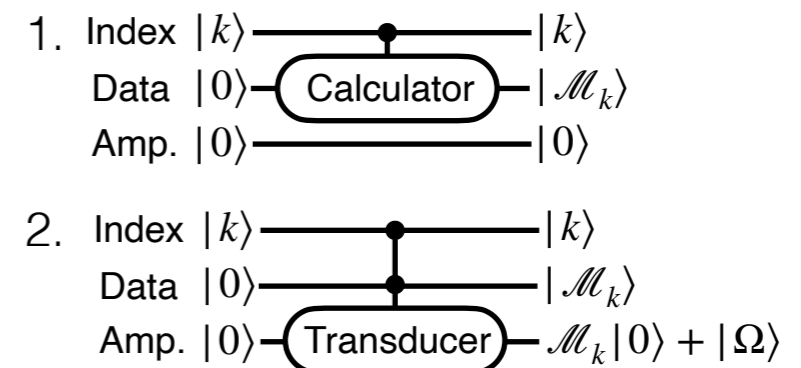
1. 補助レジスタを使い、 $\mathcal{M}(\Phi_k)$ の計算値を書き出す

$$\sum_k |k\rangle \otimes |0\rangle_{\text{anc}} \rightarrow \sum_k |k\rangle \otimes |\mathcal{M}(\Phi_k)\rangle_{\text{anc}}$$

2. 補助レジスタの数値を振幅の係数に変換する

$$\sum_k |k\rangle \otimes |\mathcal{M}(\Phi_k)\rangle_{\text{anc}} \rightarrow \sum_k \mathcal{M}(\Phi_k) |k\rangle \otimes |\mathcal{M}(\Phi_k)\rangle_{\text{anc}}$$

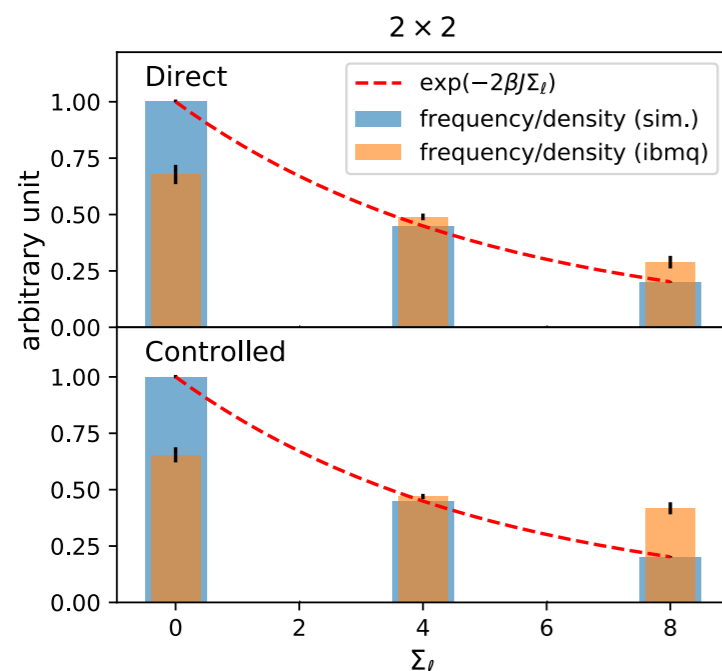
- ステップ1, 2ともR&Dが必要



ステップ2: Amplitude transduction

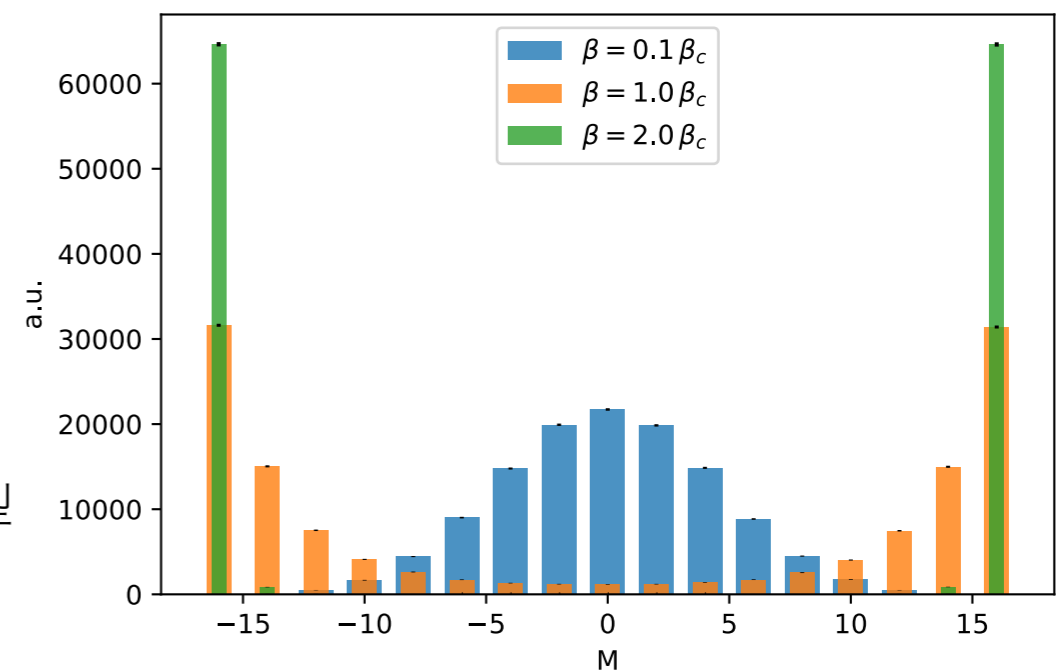
Y. I. (2006.00975)

- Amplitude transductionという発想自体は20年前から存在
 - Grover, PRL 85 (2000)
 - Sanders et al., PRL 122 (2019)
- 必要な量子ビット & ゲートの数が多すぎる
 - これまで理論的な検証のみ
- 2006.00975: より効率的なアルゴリズムを提唱
 - 小さい系のMCシミュレーションを実際のQCで実行



← 2×2スピニング模型
エネルギー分布
(実機&シミュレータ)

4×4スピニング模型
温度ごとの磁化分布→



まとめ

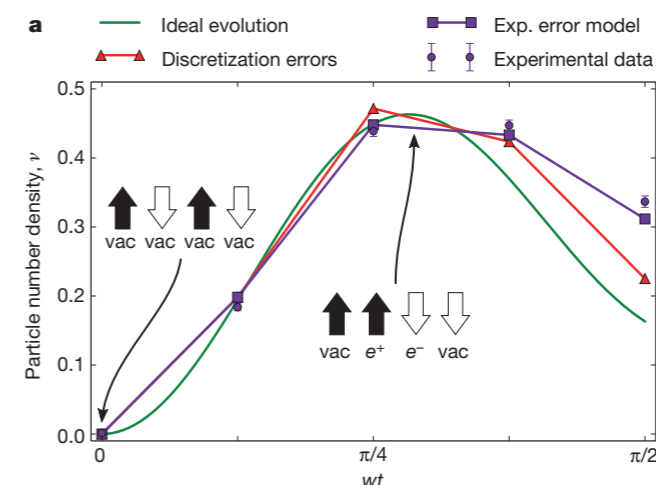
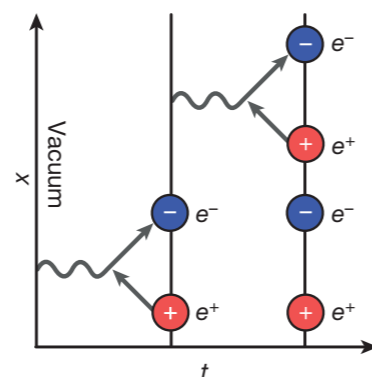
- 量子コンピュータはHEPのシミュレーションに使える
- 量子系の時間発展シミュレーションは「お家芸」
- 一回一回の計算の終状態の測定結果がHEPのイベントに対応
 - 量子計算はイベント確率分布の準備過程ともみなせる
- 確率分布を直接計算（a la 現行ジェネレータ）してもいい
 - 積分が不要→将来多粒子のMCで役に立つ
- 直接計算法に必要な材料のR&Dが進行中
- まだまだアイディア出しの余地あり。一緒に研究しませんか

BACK UP

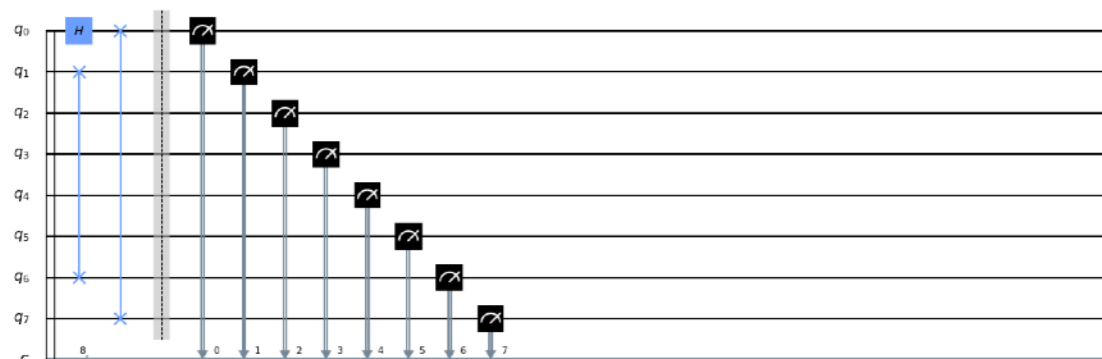
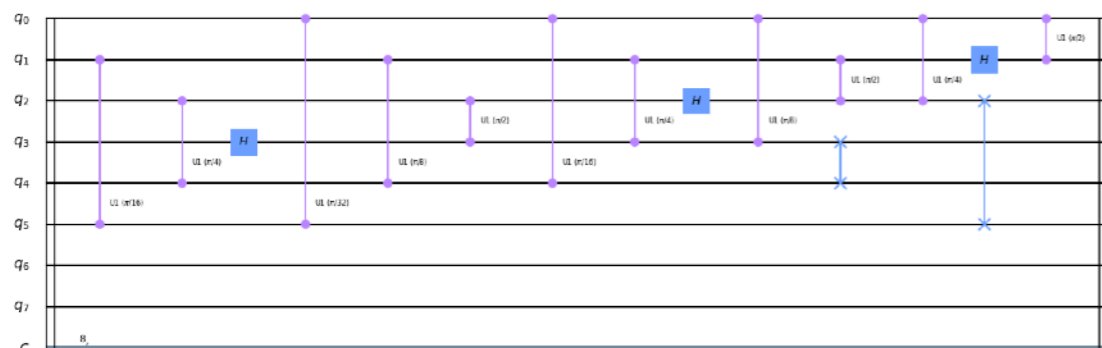
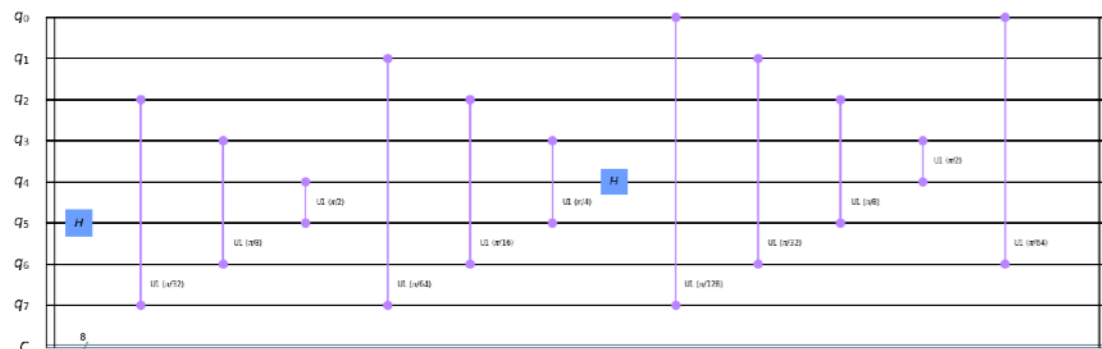
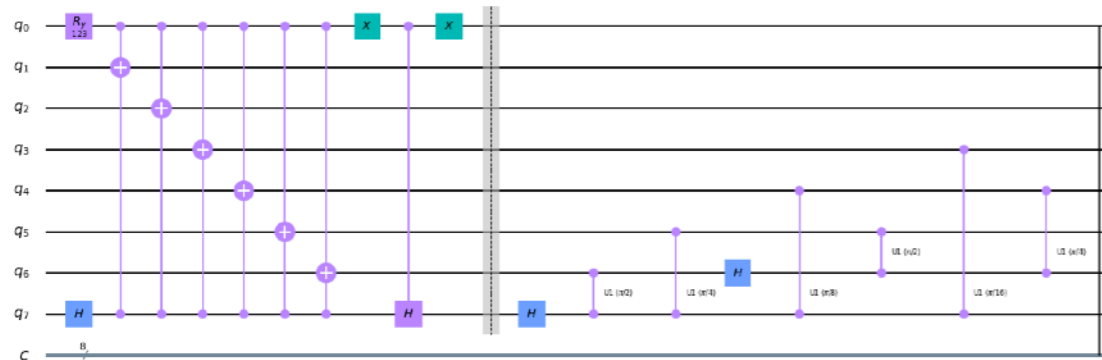
Lattice Schwinger model

Martinez et al. (Nature 534)

- Schwinger model = 1+1次元 QED
- フェルミオン場 → 自由度は「各サイトに粒子がある／ない」
→ 量子ビットの0/1にうまく対応
- QEDラグランジアンを基にしたハミルトニアンで時間発展
 - 粒子・反粒子の生成・消滅の様子がシミュレートされる
- 時間T後に測定
→ 粒子・反粒子場の様々な構成が確率に応じて得られる



$1 + \cos\theta$



$$\sqrt{\frac{2}{3}}|0\rangle + \sqrt{\frac{1}{6}}|1\rangle + \sqrt{\frac{1}{6}}|2^n - 1\rangle$$

↓ F.T.

$$\frac{1}{2^{n-1}}\sqrt{\frac{2}{3}}\sum_k \left[1 + \frac{1}{2} \left(e^{\frac{2\pi i}{2^n}k} + e^{-\frac{2\pi i}{2^n}k} \right) \right] |k\rangle$$