پیشرفت‌های اخیر در بکارگیری محاسبات کوانتومی در کاربردهای هسته ای

INC29-1347

معصومه محمدیان*، یاشار حیدری

دانشکده فیزیک و مهندسی انرژی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، صندوق پستی: ۱۵۸۷۵-۴۴۱۳، تهران، ایران

چکیده:

محاسبات کوانتومی اخیراً در حال پیشرفت سریعی بوده و پتانسیل ارائه راه‌حل‌هایی برای چالش‌های محاسباتی در مدلسازی و تحلیل برهمکنش‌های هسته‌ای را دارد. در این مسیر چالش‌هایی نیز وجود دارد؛ از جمله: - نحوه تفسیر معادلات و روابط فیزیک کلاسیک با روابط کوانتومی و ایجاد قابلیت تبدیل این روابط به الگوریتم‌هایی که قابل اجرا در کامپیوترهای کوانتومی باشد، - میزان کیوبیت‌های فیزیکی لازم برای پیاده‌سازی یا بهینه‌سازی در حضور نویز، عموما بسیار بیشتر از آنچه در حال حاضر موجود است، می‌باشد. روش‌ها و راه‌کارهای تعریف مسائل فیزیک هسته‌ای در کامپیوترهای کوانتومی و یافتن روشهایی برای کاهش کیوبیت‌های مورد نیاز، مطالعاتی است که با سرعت زیادی به‌روز می شوند. در سال‌های اخیر، ترکیب روش‌های کوانتومی و روش مونت کارلو که از روش‌های اصلی مدل‌سازی‌های برهمکنش‌های هسته‌ای است، به یافته‌های جدیدی در هسته‌های سبک و جرم متوسط، ماده نوترونی و واکنش های ضعیف الکتریکی رسیده است. در این مقاله، هدف ما مروری بر پژوهش‌های اخیر در زمینه تعریف و حل مسائل فیزیک هسته‌ای با کامپیوترهای کوانتومی است.

کلیدواژه‌ها: محاسبات کوانتومی، برهمکنش‌های هسته ای ، مونت کارلو

Recent Advances on Quantum calculation Methods in Nuclear applications

M. Mohamadian, Y. heidari

Physics and Energy Department, Amirkabir University of Technology, P.O.BOX: 15875-4413, Tehran-Iran.

Abstract:

Quantum computing has been developing rapidly and has the potential to provide solutions to computational problems in modeling and analyzing nuclear interactions. There are also challenges in this path, including; How to interpret the equations and relationships of classical physics with quantum relationships and create the ability to transform these relationships into algorithms that can be implemented in quantum computers. Also, the number of physical qubits required for implementation or optimization in the presence of noise is generally much more than what is currently it is present. Methods and solutions for defining nuclear physics problems in quantum computers and finding ways to reduce the required qubits are studies that are updated at a high speed. In recent years, the combination of quantum methods and Monte Carlo method, which is one of the main methods of modeling nuclear interactions, has reached new findings in light and medium mass nuclei, neutron matter and weak electric reactions. In this article, our goal is to review recent researches in the field of defining and solving nuclear physics problems with quantum computers.

Keywords: Quantum computing, nuclear interactions, Monte Carlo.

۱. مقدمه

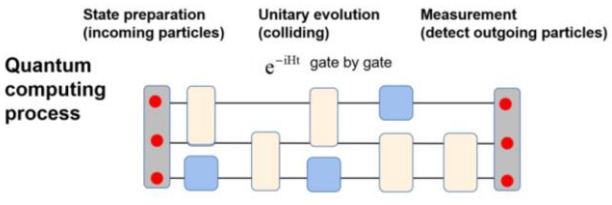
در سال‌های اخیر، محاسبات کوانتومی در حال پیشرفت سریعی بوده و علاوه بر کاربردهای بسیار در تمامی حوزه‌های علوم، پتانسیل ارائه راه‌حل‌هایی برای چالش‌های محاسباتی در مدل‌سازی و تحلیل برهمکنش‌های هسته‌ای را نیز دارد [۱]. محاسبات کوانتومی یک رویکرد شاید دگرگون‌کننده برای مطالعه و درک فیزیک هسته‌ای فراهم کند. با افزایش سریع پردازشگرهای کوانتومی و همچنین پیشرفت در الگوریتم‌های کوانتومی، رویکرد شبیه‌سازی کوانتومی دیجیتال برای شبیه‌سازی میدان‌های کوانتومی و فیزیک هسته‌ای توجه بسیاری را به خود جلب کرده است [۲]. کاربردهای بالقوه زیادی در این حوزه وجود دارد، از جمله؛ - بکارگیری الگوریتم‌های شبیه‌سازی کوانتومی در مدل‌سازی برهمکنش‌ها و یا بررسی برخورد هسته‌ها با یکدیگر، تشخیص الگوی کوانتومی و یادگیری ماشین کوانتومی به منظور پیش‌بینی نتیجه فرایندها، و ... [۳،۱]. در این مسیر چالش‌هایی نیز وجود دارد، از جمله - نحوه تفسیر معادلات و روابط فیزیک کلاسیک با روابط کوانتومی و ایجاد قابلیت تبدیل این روابط به الگوریتم‌هایی که قابل اجرا در کامپیوترهای کوانتومی باشند. - میزان کیوبیت‌های فیزیکی لازم برای پیاده‌سازی که عموما بسیار بیشتر از آنچه در حال حاضر موجود است، می باشد. در این خصوص زمینه‌های مطالعاتی شکل گرفته و روش‌هایی برای کاهش کوبیت‌ها پیشنهاد می شود. - یکی دیگر از چالش‌های برخی الگوریتم‌ها (همچون الگوریتم های تشخیص الگو) این است که نیاز به حجم زیادی از داده‌ها برای پردازش در دستگاه کوانتومی دارند و انتقال این داده‌ها ممکن است سرعت چنین الگوریتم‌هایی را محدود کند. یادگیری ماشین کوانتومی یک مسیر امیدوارکننده اولیه در سیستم‌های NISQ، برای تمام صنایع و حوزه‌های علوم است. در همه مسائلی که قصد حل آن‌ها با روش‌های کوانتومی را داریم، در قدم اول، مسئله باید ساده شود تا بتوان آن را روی سیستم‌های با مدارهای کوانتومی یا همان کامپیوترهای کوانتومی اجرا کرد[۱].

در این مقاله، هدف ما مروری بر تلاش‌های اخیر در زمینه حل مسائل فیزیک هسته‌ای با کامپیوترهای کوانتومی است. ابتدا اشاره‌ای به نحوه مدل‌سازی فیزیک هسته‌ای به زبان محاسبات کوانتومی خلاصه‌ای را ارائه می‌نماییم. سپس الگوریتم‌های کوانتومی مرتبط را برای بررسی سیستم‌های کوانتومی معرفی می‌کنیم و کاربردهای آن‌ها را برای طیف گسترده‌ای از مسائل در فیزیک هسته‌ای، از جمله شبیه‌سازی میدان شبکه، حل نوکلئون و ساختار هسته‌ای، مزیت کوانتومی برای شبیه‌سازی، پراکندگی در نظریه میدان کوانتومی، دینامیک غیرتعادلی و غیره نشان می‌دهیم. در نهایت، یک چشم‌انداز کوتاه در مورد کارهای آینده ارائه می‌شود.

۲. روش کار:

۲. ۱. نگاشت یا ترجمه اطلاعات فیزیک هسته ای بر روی کامپیوترهای کوانتومی:

شبیه‌سازی الگوریتم‌ها و روابطِ فیزیک هسته‌ای بر روی یک کامپیوتر کوانتومی، در مرحله اول نیاز به نگاشت درجات آزادی فیزیکی اولیه روی کیوبیت‌ها دارد. در یک کامپیوتر کوانتومی، واحد اصلی برای رمزگذاری اطلاعات، بیت کوانتومی است که می‌تواند حالات برهم‌نهی $|0\rangle$، $|1\rangle$ را ذخیره کند. به طور کلی، اطلاعات به صورت یک حالت کوانتومی چند کیوبیتی بیان می‌شود. با چند صد کیوبیت، یک کامپیوتر کوانتومی می‌تواند حالات کوانتومی را ذخیره کند که فراتر از ظرفیت کامپیوترهای کلاسیک است. سپس، اطلاعات یا کمیت‌های مورد علاقه را می‌توان با اندازه‌گیری مکرر حالت‌های کوانتومی نهایی استخراج کرد. همچنین در مواردی، ممکن است نیاز به پس پردازش بیشتر در رایانه کلاسیک باشد. فرآیند فیزیکی و شبیه‌سازی مربوط به آن در یک کامپیوتر کوانتومی در شکل ۱ نشان داده شده‌است [۲].



شکل ۱. نمایش تحلیل فیزیک هسته ای بر روی یک کامپیوتر کوانتومی. شبیه سازی یک فرایند فیزیکی از پراکندگی در آزمایشات برخوردکننده بزرگ هادرونی

مسائل مطرح در فیزیک هسته‌ای عموما شامل مسائل مربوط به حالت‌های دائمی[1]، (مانند ساختار نوکلئون‌ها و حالات ماده)، و سیر تغییرات لحظه‌ای واکنش‌ها، (مانند حل مسئله پراکندگی) و تغییرات و واپاشی‌های عناصر هسته‌ای است. و این در حالی است که آماده‌سازی حالت‌های دائمی و پایدار و شبیه‌سازی سیر تغییرات لحظه‌ای واکنش‌ها، تکنیک‌های استاندارد در محاسبات کوانتومی بوده و انواع مختلفی از روش‌ها بدین منظور توسعه یافته‌اند. در نتیجه، بسیار مهم است که ابتدا مسائل مرتبط فیزیک هسته‌ای را به فرمول‌هایی تبدیل کنیم که یک کامپیوتر کوانتومی بتواند با آن‌ها کار کند. چراکه اجزای اصلی یک کامپیوتر کوانتومی عبارتند از کیوبیت‌ها برای رمزگذاری اطلاعات و مجموعه جهانی دروازه‌های کوانتومی تک و دو کیوبیتی برای کار با اطلاعات و اندازه‌گیری‌ها برای استخراج اطلاعات [۲].

۲. ۲ . الگوریتم‌های کوانتومی به منظور شبیه‌سازی مسائل فیزیک هسته‌ای:

روش‌های مختلفی برای محاسبات کوانتومی در سیستم‌های فیزیکی و شیمیایی ایجاد شده‌اند، اما بسیاری از آن‌ها به تعداد زیادی کیوبیت یا بهینه‌سازی با ابعاد بالا در حضور نویز نیاز دارند. به عنوان مثال، کاربرد عملی این الگوریتم‌ها برای محاسبات کوانتومیِ چالش‌برانگیزِ مرتبط با فیزیک هسته‌ای، با استفاده از انرژی اتصال دوترون و اتصال هیدروژن مولکولی و انرژی‌های حالت برانگیخته در [۴] نشان داده شده‌است.

این روشها منجر به توسعه ابزارهای کوانتومی برای علوم هسته‌ای و همچنین ارائه تخصص در فیزیک هسته‌ای به سیستم‌های کوانتومی می‌شود. بدین ترتیب از آنجائیکه هدف بهبود کارایی و مقیاس‌پذیری الگوریتم‌های شبیه‌سازی کوانتومی است، در نتیجه بینش‌های جدیدی در مورد کاربرد آن‌ها برای مطالعات آتی هسته‌ها و مواد هسته‌ای ارائه می‌شود [۱].

۲. ۲. ۱. برهمکنش‌های هسته‌ای:

برای مطالعه سیستم‌های مبتنی بر علوم هسته‌ای، بایستی در ابتدا اساس برهمکنش‌های هسته‌ای و نگاه کوانتومی به آن‌ها را بررسی نمود. در این راستا محققین بسیاری در حوزه‌های زیر مطالعات زیادی را به ویژه در سال‌های اخیر انجام داده‌اند که عبارتند از؛ برهمکنش‌های نوکلئون- نوکلئون [۵]، نیروهای سه جسمی[2] [۶]، همیلتونی هسته‌ای با توجه به تئوری میدان موثر کایرال [۷]، بررسی هسته‌های سبک، طیف انرژی [۸]، پراکندگی‌های انرژی پایین [۹]، برهمکنش‌های کایرال [۱۰] و ...

۲. ۲. ۲. همیلتونی[3]:

در محدوده قابل توجهی از انرژی و لحظه، ساختار و واکنش‌های هسته‌ها و ماده نوکلئونی را می‌توان با یک همیلتونی غیر نسبیتی با نوکلئون‌ها به عنوان تنها درجات فعال آزادی مطالعه کرد. انرژی‌های اتصال هسته‌ای معمولی ۱۰ مگاالکترون ولت در هر نوکلئون و گشتاور فرمی حدود $1,35\ fm^{-1}$ هستند. نوکلئون‌ها اساساً غیرنسبیتی هستند، حتی اگر همبستگی‌های قابل توجهی فراتر از میدان میانگین وجود داشته باشد. داده‌های پراکندگی نوکلئون-نوکلئون (NN) زیادی وجود دارد که به شدت مدل‌های برهمکنش احتمالی NN را محدود می‌کند. برهمکنش‌های هسته‌ای به دست آمده در تئوری میدان مؤثر کایرال، تناسب دقیقی را با این داده‌ها فراهم می‌کنند. با این حال، این میزان برای بازتولید اتصال هسته‌ای کافی نیست، زیرا تحریکات داخلی نوکلئون نیز موثر است. با این حال، به جای در نظر گرفتن این تحریکات به عنوان درجات دینامیک آزادی، استفاده از آن‌ها و سایر اثرات به عنوان برهمکنش‌های سه نوکلئونی (3N) معمول‌تر است.

[1] Steady states
[2] Three-body
[3] Hamiltonian

بنابراین، می‌توان برانگیختگی‌های نوکلئونی و سایر درجات آزادی را با هم ترکیب کرد که در نتیجه یک هامیلتونی به شکل $H = K + V$ ، که K انرژی جنبشی است و V یک برهمکنش مؤثر است، بدست می‌آید. که در اصل شامل پتانسیل‌های N نوکلئون است، ($N \geq 2$) و برابر است با $V = \sum_{i<j} v_{ij} + \sum_{i<j<k} V_{ijk} + \cdots$ [۴].

۲. ۲. ۴. روش‌های مونت کارلو و کوانتوم مونت کارلو:

در سال‌های اخیر، ترکیب روش‌های کوانتومی مونت کارلو (QMC) با برهمکنش‌های هسته‌ای واقعی و جریان‌های ضعیف الکتریسیته ثابت، به‌ویژه آن‌هایی که در تئوری‌های میدان مؤثر (EFTs) ساخته شده‌اند، به بینش‌های جدیدی در هسته‌های سبک و جرم متوسط، ماده نوترونی و واکنش‌های ضعیف الکتریکی منجر شده است. این روش‌های جدید نیز، با پیشرفت در روش‌های QMC برای فیزیک هسته‌ای امکان‌پذیر شده‌است [۱۱].

روش‌های مونت کارلو کوانتومی برای مطالعه ساختار و واکنش‌های هسته‌های سبک و ماده نوکلئونی با شروع برهم‌کنش‌ها و جریان‌های هسته‌ای واقعی بسیار ارزشمند هستند. این محاسبات از ابتدا بسیاری از حالت‌ها، گشتاورها و انتقال‌ها را در هسته‌های سبک بازتولید می‌کنند و به طور همزمان بسیاری از خواص هسته‌های سبک و ماده نوترونی را در محدوده نسبتاً وسیعی از انرژی و زمان پیش‌بینی می‌کنند. این روش‌ها مشابه روش‌هایی هستند که در ماده چگال و ساختار الکترونیکی استفاده می‌شوند، اما به طور طبیعی شامل برهم‌کنش‌های اسپین-ایزواسپین، تانسور، اسپین-مدار و سه جسم هستند. نتایج مختلفی از جمله طیف‌های کم ارتفاع هسته‌های نوری، عوامل شکل هسته‌ای و عناصر ماتریس انتقال را می توان با استفاده از این مفاهیم ارائه نمود. همچنین تکنیک‌های پراکندگی کم‌انرژی، مطالعات واکنش الکتروضعیف هسته‌های مربوط به پراکندگی الکترون و نوترینو، و خواص ماده نوکلئونی متراکم را که در ستاره‌های نوترونی یافت می‌شود، می توان توصیف کرد. با این توصیفات، تصویری منسجم از ساختار و دینامیک هسته‌ای بر اساس برهمکنش‌ها و جریانات نسبتاً ساده اما واقعی ظاهر می‌شود[۱۲].

الگوریتم‌های کوانتومی مونت کارلو تنوع زیادی دارند و پرداختن به همه آن‌ها از حوصله این بررسی خارج است. ما خودمان را به توصیف زیرمجموعه خاصی از الگوریتم‌های QMC محدود می‌کنیم که به طور مداوم برای بسیاری از مسائل نوکلئون اعمال شده‌است، یعنی الگوریتم‌هایی که بر اساس نمایش مختصری از همیلتونی هستند، و بر اساس نمونه‌برداری بازگشتی از چگالی احتمال عمل می‌کنند. این مجموعه از روش‌ها شامل روش‌های مونت کارلوی وردشی استاندارد (VMC)[۴]، مونت کارلو تابع گرین (GFMC)[۵] و مونت کارلو انتشاری[۶] می‌باشند.

این روش‌ها طیف وسیعی از مشکلات و مسائل موجود را با موفقیت حل می‌کنند. زمینه‌های اصلی کاربرد این مجموعه از الگوریتم‌ها شیمی کوانتومی و علم مواد است [۱۳]. کاربردهای دیگر در نظریه ماده چگال مربوط به فیزیک سیستم‌های هلیوم چگال می‌باشد [۱۴]. علاوه براین حوزه‌ها، به دلیل همبستگی‌های قوی ناشی از همیلتون‌های هسته‌ای، روش‌های QMC در درک خواص هسته‌ها و ماده نوکلئونی و مدل‌سازی برهمکنش‌ها نیز بسیار ارزشمند هستند.

— Variational Monte Carlo

روش‌های VMC برای استفاده در تحلیل برهمکنش‌های هسته‌ای در اوایل دهه ۱۹۸۰ معرفی شدند [۱۵]. در روش VMCنیاز به درک دقیقی از ساختار سیستم وجود دارد که باید بررسی شود. به طور معمول، یک کلاس خاص از توابع موج آزمایشی در نظر گرفته می‌شود و با استفاده از ربع مونت کارلو برای ارزیابی انتگرال‌های چند بعدی، با توجه به تغییرات در مجموعه‌ای از پارامترهای متغیر انرژی به حداقل می‌رسد. در VMC ، یک فرم برای تابع موج آزمایشی در نظر گرفته و پارامترهای متغیر را، معمولاً با به حداقل رساندن انرژی و/یا واریانس انرژی با توجه به تغییرات در پارامترها، بهینه می‌کنند.

[4] Variational Monte Carlo
[5] Green's Function Monte Carlo
[6] Diffusion Monte Carlo methods

Green's Function Monte Carlo —

روش‌های GFMC برای نمایش حالت پایه با مجموعه خاصی از اعداد کوانتومی استفاده می‌شوند. روش‌های GFMC در دهه ۱۹۶۰ ابداع شد [۱۶] و برای بسیاری از مسائل مختلف در ماده چگال، شیمی و زمینه‌های مرتبط به کار رفته‌است. این موارد، ارتباط نزدیکی با الگوریتم‌های دمای محدود دارند که در همه آن‌ها ماتریس چگالی محاسبه می‌شود [۱۷]. اما آن‌ها از توابع موج آزمایشی[۷] در مرز مسیرها برای نمایش اعداد کوانتومی حالت‌های خاص استفاده می‌کنند.

همچنین، GFMC در فیزیک هسته‌ای برای هامیلتونی‌های وابسته به اسپین-ایزواسپین در اواخر دهه ۱۹۸۰ معرفی شد [۱۸]. این موضوع شامل طرح ریزی حالت پایه از یک حالت آزمایشی اولیه با تکامل در زمان موهومی بر حسب انتگرال مسیر، با استفاده از تکنیک‌های مونت کارلو برای نمونه برداری از مسیرها است. GFMC زمانی بهترین کار را می‌کند که یک تابع موج آزمایشی دقیق در دسترس باشد، که اغلب از طریق محاسبات اولیه VMC توسعه می‌یابد. این روش برای هسته‌های سبک بسیار دقیق است، اما حرکت به سمت سیستم‌های بزرگتر دشوارتر می‌شود. رشد زمان محاسبه در تعداد ذرات به دلیل تعداد حالت‌های اسپین و ایزوسپین به صورت تصاعدی است. بزرگترین محاسبات هسته‌ای GFMC تا به امروز مربوط به هسته کربن ۱۲ [۱۹] و برای سیستم‌های ۱۶ نوترونی [۲۰] و تعداد حالات اسپین-ایزوسپین بالا، بوده است.

روش GFMC برای محاسبه حالت‌های ناپایدار هسته‌ها تا دمای ۱۲ درجه سانتیگراد بسیار خوب عمل می‌کند. محدودیت اصلی آن این است که هزینه‌های محاسباتی به‌دلیل جمع‌بندی کامل حالت‌های اسپین-ایزوسپین به صورت نمایی با تعداد ذرات مقیاس می‌شوند. یک رویکرد جایگزین، استفاده از مبنایی است که توسط حاصلضرب بیرونی حالت‌های موقعیت نوکلئون، و محصول بیرونی حالت‌های اسپین-ایزواسپین تک نوکلئونی ارائه شده است.

Auxiliary Field Diffusion Monte Carlo —

مونت کارلو انتشاری میدان کمکی (AFDMC)[۸] در سال ۱۹۹۹ معرفی شد [۲۱]. در این الگوریتم وابستگی به اسپین و ایزوسپین با استفاده از فیلدهای کمکی بررسی می‌شود. این میدان‌ها با استفاده از تکنیک‌های مونت کارلو نمونه‌برداری می‌شوند، و انتشار فضای مختصات در GFMC گسترش می‌یابد تا شامل انتشار در حالت‌های اسپین و ایزوسپین هر نوکلئون نیز باشد. این الگوریتم در بررسی سیستم‌های بزرگ بسیار کارآمدتر است. همچنین این روش، در مطالعه ماده نوترونی همگن و ناهمگن بسیار موفق بوده است و اخیراً نشان داده شده‌است که برای محاسبه خواص هسته‌های سنگین‌تر، و سیستم هایپرون‌ها، نیز بسیار امیدوارکننده است [۲۲]. اگرچه این روش به توابع موج آزمایشی ساده‌تری نیاز دارد، ولی هنوز در پیچیدگی همیلتونی‌های هسته‌ای که بتوان از آن استفاده کرد کاملاً انعطاف‌پذیر نیست. گسترش دامنه برهمکنش‌هایی که می توان با AFDMC بررسی کرد، همچنان یک حوزه فعال تحقیقاتی است.

۲. ۲. ۵. رایانه‌های کوانتومی مقیاس متوسط نویزی[۹] (NISQ) و روش QIET:

رایانه‌های کوانتومی NISQ اخیراً به پلتفرم‌هایی برای مطالعه کدنویسی و طراحی الگوریتم‌های کوانتومی کوتاه‌مدت تبدیل شده‌اند. روش‌های وردشی برای حل مسائل در شیمی، فیزیک هسته‌ای، نظریه میدان کوانتومی، فیزیک انرژی بالا و موارد دیگر از جمله روش‌های مناسب در این سیستم‌ها می‌باشد. یک رویکرد برای مسئله زمان همدوس کوتاه، روش QIET [۱۰] است که در آن تکامل غیر یکه را می‌توان به‌صورت متغیر محاسبه کرد. با ترکیب QITE با روش بهینه‌سازی Lanczosکه در زمینه محاسبات کوانتومی به صورت qLanczos در می‌آید، می‌توان پدیده‌های تکامل‌یافته در زمان، در سیستم‌های many-body را به دست آورد. با انتخاب صحیح حالت‌های اولیه و نهایی، می‌توان نشان داد که تعداد گام‌های زمانی در QITE [۲۳] و qLanczos [۲۴و ۴] را می‌توان به میزان قابل توجهی کاهش داد، که به نسبت، مدار کوانتومی مورد نیاز را نیز ساده می‌کند و سازگاری با دستگاه‌های NISQ را بهبود می‌بخشد. در این روش‌ها، با استفاده

[7] Trial wave functions
[8] Auxiliary Field Diffusion Monte Carlo
[9] Noisy intermediate scale quantum - NISQ
[10] Quantum Imaginary Time Evolution - QITE

از کاهش خطای خواندن و برون‌یابی خطای ریچاردسون [۲۵]، انرژی‌های حالت پایه و برانگیخته را می‌توان به دست آورد، که به خوبی با نتایج دقیق به دست آمده از روش قطری سازی[11] مطابقت دارد [۴].
یک مزیت کلیدی الگوریتم QITE نسبت به روش‌های وردشی، توانایی استفاده از این روش در الگوریتم qLanczos برای محاسبه حالت‌های برانگیخته است. این موضوع بسیار مورد علاقه مطالعات و شبیه سازی‌های حوزه فیزیک هسته‌ای است [۴]

۳. کاربردها در حوزه فیزیک و علوم هسته ای:

کاربردهای این مسیر علمی نسبتا جدید، همه حوزه‌های علوم و زندگی را شامل می‌شود. برخی از این موارد به ظهور رسیده و بکار می‌رود، همچون کاربردهای گسترده‌ای که در علم مواد و شیمی وجود دارد. برخی دیگر از موضوعات و چالش‌های روز محققین در علوم مختلف است. در حوزه علوم هسته‌ای، اکتشافاتی در مورد خواص ایزوتوپ‌های کمیاب به منظور درک بهتر فیزیک هسته‌ها، اخترفیزیک هسته‌ای، برهمکنش‌های اساسی، و کاربردها برای جامعه، از جمله در پزشکی، امنیت داخلی و صنعت، مواردی هستند که همگی می‌توانند منجر به تحولات اساسی در این حوزه گردند. از بیان کاربردهای کلی صرفنظر کرده و صرفا کاربردهایی که به علوم هسته‌ای مرتبط می‌باشد را در ادامه مرور می‌کنیم.

- محاسبات کوانتومی در تحلیل نتایج برخوردکننده‌های بزرگ[12] [۲۶]
- تشخیص الگو ذرات باردار
- بررسی ساختارهای هسته‌ای
  - بررسی انرژی بستگی هسته‌های اتم‌ها
  - فیزیک Parton
- شبیه سازی real-time حالت پایه و فرگشت تئوری سنجه‌ای شبکه‌ای[13] با استفاده از مدل‌هایی همچون مدل شرودینگر [۲۶]
- طبقه بندی مبتنی بر VQA و QSVM در تجزیه و تحلیل داده‌های نمونه برای برخوردهای pp و e + e- [۲۷]
- رویکرد QML در شبیه‌سازی آشکارساز، با نمایش بازتولید از رسوبات انرژی
- بکارگیری آزمایشی طرح‌های کوانتومی در سیستم تشدید مغناطیسی هسته‌ای (MRI/NMR)

همانطور که اشاره شد، پیشرفت‌های سریعی در پردازش اطلاعات کوانتومی صورت گرفته است و در سال‌های اخیر دستاوردهای قابل‌توجهی هم در تئوری و هم در تجربیات بدست آمده است. یکی از این موارد که بسیار پرکاربرد در بسیاری از حوزه‌های پزشکی و صنعتی می‌باشد، سیستم‌های NMR/MRI هستند. کنترل هم دوس اسپین هسته‌ای یک ابزار قدرتمند برای اجرای آزمایشی طرح‌های کوانتومی در سیستم تشدید مغناطیسی هسته‌ای مایع و جامد، به‌ویژه در NMR حالت مایع است. در مقایسه با سایر سیستم‌های پردازش اطلاعات کوانتومی، پلتفرم NMR دارای مزایایی مانند زمان همدوسی طولانی، تجزیه دقیق و تکنیک‌های کنترل کوانتومی توسعه یافته است که امکان کنترل دقیق یک سیستم کوانتومی تا ۱۲ کیوبیت را ممکن می‌سازد. کاربردهای گسترده طیف‌سنجی NMR حالت مایع در پردازش اطلاعات کوانتومی مانند ارتباطات کوانتومی، محاسبات کوانتومی و شبیه‌سازی کوانتومی بیش از نیم قرن به طور کامل مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. اصول کلی پردازش اطلاعات کوانتومی NMR در [۲۸] معرفی شده‌اند و تکنیک‌های جدید توسعه‌یافته را مرور می‌کنند. از جمله دستاوردهای اخیر تحقق تجربی الگوریتم‌های کوانتومی برای یادگیری ماشین، شبیه‌سازی کوانتومی برای فیزیک انرژی بالا و نظم توپولوژیکی در NMR در [۲۹] آمده‌است. همچنین محدودیت‌ها و چشم‌انداز طیف سنجی NMR حالت مایع و سیستم های NMR حالت جامد به عنوان محاسبات کوانتومی در [۲۸] مورد بحث قرار داده شده است.

[11] Diagonalization
[12] Colliders
[13] Lattice Gauge Theory

۴. چالش ها و مسائل قابل حل مباحث فیزیک هسته ای:

بسیاری از چالش‌های مهم در آینده نزدیک، هم در هسته‌های سبک و هم هسته‌های سنگین و ماده نوکلئونی مورد بررسی قرار خواهند گرفت. در هسته‌های سبک، مطالعه واکنش‌های هسته‌ای پیچیده‌تر مهم خواهد بود. این موارد می‌توانند مشکلاتی را که در آن انجام آزمایش‌های تجربی در عمل دشوار است، برطرف کنند. از جمله واکنش‌هایی در انرژی‌های بسیار پایین که در آن سد کولن سرعت واکنش را کند می‌کند، یا واکنش‌هایی بر روی هسته‌های ناپایدار که در زمان کوتاه بایستی نتیجه ثبت گردد. علاوه براین، آزمایش‌های تقارنهای اساسی[۱۴]، از جمله گشتاورهای دوقطبی الکتریکی در هسته‌های سبک، قابل بررسی خواهد شد. بسیاری از این مشکلات فقط به پیشرفت‌های متوسطی در تئوری و محاسبات نیاز دارند و باید بتوان تعداد قابل توجهی را در چند سال آینده مورد بررسی قرار داد.

پراکندگی نوترینو و پاسخ هسته‌ای آن، هم در هسته‌های نسبتاً سبک مانند کربن و اکسیژن و هم در هسته‌های سنگین‌تر مانند آرگون از اهمیت اساسی برخوردار است. محاسبات پاسخ بار/جریان کربن حاوی اطلاعات بسیار مهمی خواهد بود، به ویژه در مورد تفاوت سطح مقطع نوترینو به ضد نوترینو. این موضوع نقش کلیدی در تلاش‌های آینده برای اندازه‌گیری سلسله مراتب جرم نوترینو و فاز نقض CP با استفاده از نوترینوهای شتاب‌دهنده دارد. محاسبات در هسته‌های سنگین‌تر به ما این امکان را می‌دهد که وابستگی هسته‌ای پراکندگی شبه الاستیک را کشف کنیم، که انتظار می‌رود مانند پراکندگی الکترون نسبتاً کوچک باشد. خواص هسته‌های سنگین غنی از نوترون نیز بسیار مهم است. البته هسته‌های بزرگ‌تر نیز آزمایش‌های مهمی برای تقارن‌های بنیادی، از جمله گشتاورهای دوقطبی الکتریکی و واپاشی مضاعف بتا بدون نوترینول ارائه می‌کنند. استفاده از تکنیک‌های کوانتومی مونت کارلو برای مطالعه این مسائل چالش مهمی خواهد بود. قابلیت اطمینان و دامنه دینامیکی این مدل‌ها در برون‌یابی به رژیم‌های جدید، به‌ویژه ماده غنی از نوترون موجود در ابرنواخترها و ستاره‌های نوترونی بسیار مهم است. سوالاتی که باید در آنجا مطرح شوند عبارتند از معادله حالت و پاسخ ضعیف ماده بی‌ثبات، مربوط به سرد شدن ستارگان نوترونی، و پاسخ در رژیم‌های داغ با چگالی کم که مشخصه سطحی است که نوترینوها در ابرنواخترهای فروپاشی هسته از هم جدا می‌شوند. مطالعات معادله حالت و ارتباط آن با ادغام ستاره‌های نوترونی نیز مهم است. مشاهدات امواج گرانشی باید بتواند اطلاعات بسیار دقیق‌تری در مورد رابطه جرم-شعاع در ستاره-های نوترونی ارائه دهد. همگان مشتاقانه منتظر پیشرفت‌های چشمگیر در تئوری و محاسبات، از جمله درک دقیق‌تر از برهمکنش‌ها و جریان‌های هسته‌ای هستند. در ترکیب با چشم‌اندازهای هیجان‌انگیز در آزمایش‌ها و مشاهدات، آینده روشنی برای فیزیک هسته‌ای و ارتباط آن با نظریه کوانتومی بویژه چند جسمی، اخترفیزیک، فیزیک نوترینو و فیزیک فراتر از مدل استاندارد وجود دارد.

— کاهش کیوبیت

علاوه بر موارد فوق، امکان بکارگیری محاسبات کوانتومی در بسیاری از مسائل و شاخه‌های علمی به صورت بالقوه وجود دارد. اما یکی از موانع استفاده در برخی از موارد، نیاز به تعداد کیوبیت بالا است. در واقع یکی از چالش‌های کنونی یافتن روش‌هایی برای کاهش کیوبیت مورد نیاز در یک مدل‌سازی کوانتومی است تا امکان پیاده‌سازی آن مدل در حال حاضر وجود داشته باشد. در مدل‌سازی‌های برهمکنش‌های هسته‌ای به طوری که اکنون در حالت کلاسیک وجود دارد نیز، این محدودیت کاملا اثرگذار است. لذا یکی از مسیرهایی که در تحقیقات این حوزه وجود دارد، دستیابی به روش‌های کاهش کیوبیت مورد نیاز با ارائه الگوریتم‌های مناسب در پیاده‌سازی برهمکنش‌های هسته‌ای خاص می‌باشد.

برای مثال، در یک مدار کوانتومی که برای محاسبه ترابرد تابش در یک بعد طراحی شده است، خطای تخمین پس از N بار تکرار از مرتبه N^{-1} است. در صورتیکه در الگوریتم کلاسیک مونت کارلو، برای تعداد N آزمایش خطا $N^{-1/2}$ است. در نتیجه، می‌توان با استفاده از الگوریتم کوانتومی مقدار محاسبه را به جذر N کاهش داد. علاوه بر این، مقادیر فاصله پرواز و نوع واکنش ثبت شده در حافظه را می‌توان در محاسبه کلاسیک MC بازنویسی کرد، به طوری که حتی با حافظه کم می‌توان تعداد آزمایش‌ها را افزایش داد.

[14] Fundamental symmetries

۵. جمع بندی و نتیجه‌گیری:

در این مقاله، بررسی مقدماتی از محاسبات کوانتومی برای فیزیک هسته‌ای ارائه گردید، اما با توجه به گسترش سریع اخیر در این زمینه، بررسی کامل هنوز فراتر از محدوده این مقاله است. در اینجا بیشتر به طور خلاصه سعی شد، چشم‌اندازی از مسائل این حوزه ارائه شود. همچنین، ترکیب الگوریتم‌های کوانتومی به‌عنوان زیربرنامه‌هایی در یک الگوریتم ترکیبی کوانتومی-کلاسیک می‌تواند یک رویکرد بسیار امیدوارکننده برای حل مسائل فیزیک هسته‌ای با نتایج عملی باشد. همچنین روش‌های مونت کارلو از موارد بسیار کاربردی در این حیطه است.

شاید بسیار مفید باشد اگر بتوان یک نقشه‌راه برای نشان دادن مزایای محاسبات کوانتومی در فیزیک هسته‌ای در یک کامپیوتر کوانتومی، مطابق با افزایش مقیاس پردازنده‌های کوانتومی کوتاه مدت و تکنیک‌های کاهش خطا، پیشنهاد کرد. علاوه بر این، شناخت عملکرد نرم‌افزارهای این حوزه بسیار مهم است، زیرا پیشرفت‌های سیستماتیک و نوآوری‌های سریع در الگوریتم‌های کوانتومی و کاربردهای فیزیک هسته‌ای را امکان‌پذیر می‌سازد. در مقایسه با محاسبات کوانتومی برای شیمی [۳۰] و یادگیری ماشین کوانتومی [۳۱]، بسته‌های منبع باز[15] هنوز برای فیزیک هسته‌ای کافی نیستند، و نیازمند داشتن چنین بسته‌هایی برای تلاش در مطالعه فیزیک هسته‌ای در رایانه‌های کوانتومی همچنان احساس می شود.

همچنین اشاره شد که روش‌های کوانتوم مونت کارلو برای مطالعه ساختار و واکنش‌های هسته‌ای و ماده نوکلئونی با برهم‌کنش‌ها و جریان‌های هسته‌ای واقعی بسیار با اهمیت هستند. روش‌های QMC می‌توانند به طور همزمان پدیده‌های متنوعی را در طیفی از مقیاس‌های تکانه از جمله همبستگی‌های تانسوری قوی در فواصل کوتاه و پاسخ‌های ضعیف الکتریکی[16] مرتبط، طیف‌ها و خوشه‌بندی و گذارهای EM با انرژی پایین در هسته‌های سبک، و ابرسیالیت و ماده نوترونی چگال را بررسی کنند. معادله حالت قابل استفاده در تمامی این محدوده از سبک ترین هسته ها تا ماده نوترونی، همان مدل های هسته ای از برهمکنش ها و جریان ها است. این مدل‌ها مستقیماً از داده‌های پراکندگی نوکلئون-نوکلئون و ویژگی‌های سبک‌ترین هسته‌ها به‌دست آمده‌اند.

روش‌های QMC و مدل‌های دقیق برهمکنش و جریان، پیش‌بینی‌های کمی برای طیف‌ها، ممان‌های الکترومغناطیسی، نرخ انتقال، ضرایب شکل، ثابت‌های نرمالیزه کردن و دیگر ویژگی‌های تکانه هسته‌ها تا عدد جرمی ۱۲ را ارائه می‌کنند. نتایج اخیر به ویژه در مورد گذارهای الکترومغناطیسی در هسته‌های سبک دلگرم کننده است و به طور قطعی اهمیت مدل‌های واقعی جریان‌های دو نوکلئونی را حتی در انتقال تکانه بسیار کم، نشان می دهد. همچنین طیف گسترده‌ای از انرژی‌ها (تا حدود ۳۵۰ مگا ولت آزمایشگاهی) تحت پوشش این برهمکنش‌ها اجازه می‌دهد تا پاسخ ضعیف الکتریکی را در انتقالات تکانه نسبتاً بزرگ، مطالعه کند و معادله حالت ماده نوترونی را تا رژیمی که تکانه فرمی در حدود $2,5\ fm^{-1}$، است مطالعه کند. مدل‌های واقع‌گرایانه برهم‌کنش هسته‌ای، یک معادله سخت از حالت در چگالی‌های بالا را از دافعه دو و سه نوکلئونی پیش‌بینی میکند. رصد اخیر دو ستاره نوترونی جرم خورشیدی این رفتار را تایید می‌کند.

۶. مراجع:

1. Carlson, Joseph, et al. Quantum computing for theoretical nuclear physics, a white paper prepared for the us department of energy, office of science, office of nuclear physics. USDOE Office of Science (SC)(United States), 2018.
2. Zhang, Dan-Bo, et al. "Selected topics of quantum computing for nuclear physics." Chinese Physics B 30.2 (2021): 020306.
3. Pieper, Steven C., and Robert B. Wiringa. "Quantum Monte Carlo calculations of light nuclei." Annual Review of Nuclear and Particle Science 51.1 (2001): 53-90.
4. Yeter-Aydeniz, Kübra, Raphael C. Pooser, and George Siopsis. "Practical quantum computation of chemical and nuclear energy levels using quantum imaginary time evolution and Lanczos algorithms." npj Quantum Information 6.1 (2020): 1-8.

[15] Open source
[16] Electroweak

5. Baker, R. B., et al. "Chiral uncertainties in ab initio nucleon-nucleus elastic scattering." arXiv preprint arXiv:2301.04293 (2023).
6. Han, Jianing. "Two-dimensional three-body dipole-quadrupole interactions." Molecular Physics (2022): e2049387.
7. Gorton, Oliver C., et al. "dmscatter: A fast program for WIMP-nucleus scattering." Computer Physics Communications 284 (2023): 108597.
8. Yang, Fan, et al. "Quantum Multi-Round Resonant Transition Algorithm." Entropy 25.1 (2023): 61.
9. Fernández-Martín, Raquel. "Orbital Selective Spin-Fluctuations physics in iron-based superconductors." (2021).
10. Brinker, Sascha, Manuel dos Santos Dias, and Samir Lounis. "The chiral biquadratic pair interaction." New journal of physics 21.8 (2019): 083015.
11. Lynn, Joel E., et al. "Quantum Monte Carlo methods in nuclear physics: recent advances." *arXiv preprint arXiv:1901.04868* (2019).
12. Carlson, J., et al. "Quantum Monte Carlo methods for nuclear physics." *Reviews of Modern Physics* 87.3 (2015): 1067.
13. B.J. Hammond, 1994; Foulkes et al., 2001; Nightingale and Umrigar, 1999
14. Schmidt, K., and D. Ceperley (1992), The Monte Carlo Method in Condensed Matter Physics (ed by K. Binder Springer, Berlin).
15. Lomnitz-Adler, J., V. Pandharipande, and R. Smith (1981), Nucl. Phys. A 361 (2), 399.
16. Kalos, M. H. (1962), Phys. Rev. 128, 1791.
17. Ceperley, D. M. (1995), Rev. Mod. Phys. 67, 279.
18. Carlson, J. (1987), Phys. Rev. C 36 (5), 2026. And Carlson, J. (1988), Phys. Rev. C 38 (4), 1879.
19. Gandolfi, S., A. Lovato, J. Carlson, and K. E. Schmidt (2014), Phys. Rev. C 90, 061306.
20. Maris, P., J. P. Vary, S. Gandolfi, J. Carlson, and S. C. Pieper (2013), Phys. Rev. C 87, 054318.
21. Schmidt, K. E., and S. Fantoni (1999), Phys. Lett. B 446, 99.
22. Gezerlis, A., I. Tews, E. Epelbaum, S. Gandolfi, K. Hebeler, et al. (2013), Phys. Rev. Lett. 111 (3), 032501.
23. Gomes, Niladri, et al. "Efficient step-merged quantum imaginary time evolution algorithm for quantum chemistry." *Journal of Chemical Theory and Computation* 16.10 (2020): 6256-6266.
24. Motta, Mario, et al. "Quantum imaginary time evolution, quantum lanczos, and quantum thermal averaging." arXiv (2019): arXiv-1901.
25. Krebsbach, Michael, Björn Trauzettel, and Alessio Calzona. "Optimization of Richardson extrapolation for quantum error mitigation." arXiv preprint arXiv:2201.08080 (2022).
26. Gray, Heather M., and Koji Terashi. "Quantum Computing Applications in Future Colliders." Frontiers in Physics (2022): 473.
27. Havlíček, Vojtěch, et al. "Supervised learning with quantum-enhanced feature spaces." Nature 567.7747 (2019): 209-212.
28. Xin, Tao, et al. "Nuclear magnetic resonance for quantum computing: Techniques and recent achievements☆." Chinese Physics B 27.2 (2018): 020308.
29. Qiu, Chudan, Xinfang Nie, and Dawei Lu. "Quantum simulations with nuclear magnetic resonance system." Chinese Physics B 30.4 (2021): 048201.
30. Cao, Yudong, et al. "Quantum chemistry in the age of quantum computing." Chemical reviews 119.19 (2019): 10856-10915.
31. Melnikov, Alexey, et al. "Quantum Machine Learning: from physics to software engineering." arXiv preprint arXiv:2301.01851 (2023).