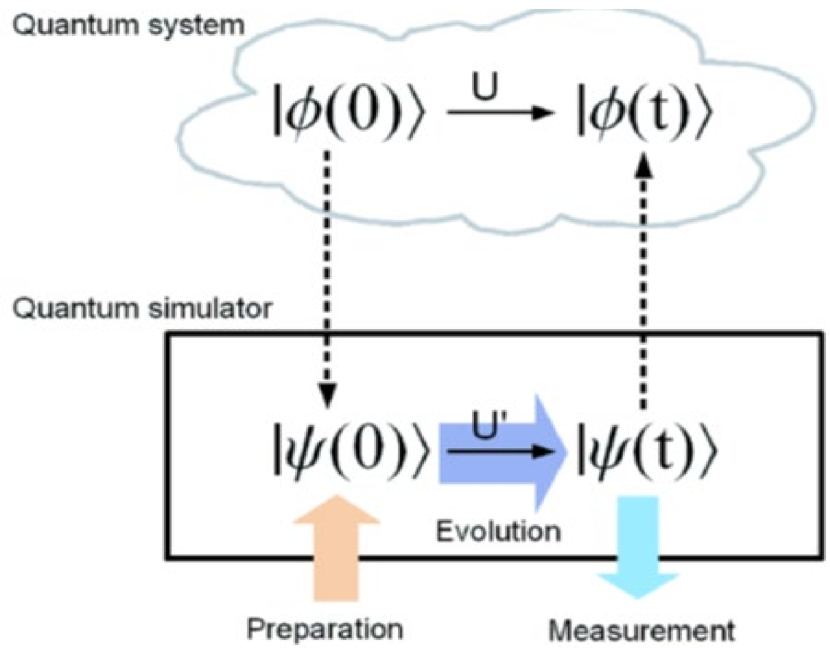
Моделирование квантовых вычислений с применением тензорных сетей на примере спиновой динамики одномерной XXZ модели.

Л. Сюракшина[1], *В. Юшанхай*[2]

[1]*ЛИТ им. М.Г.Мещерякова,* [2]*ЛТФ им. Н.Н.Боголюбова*



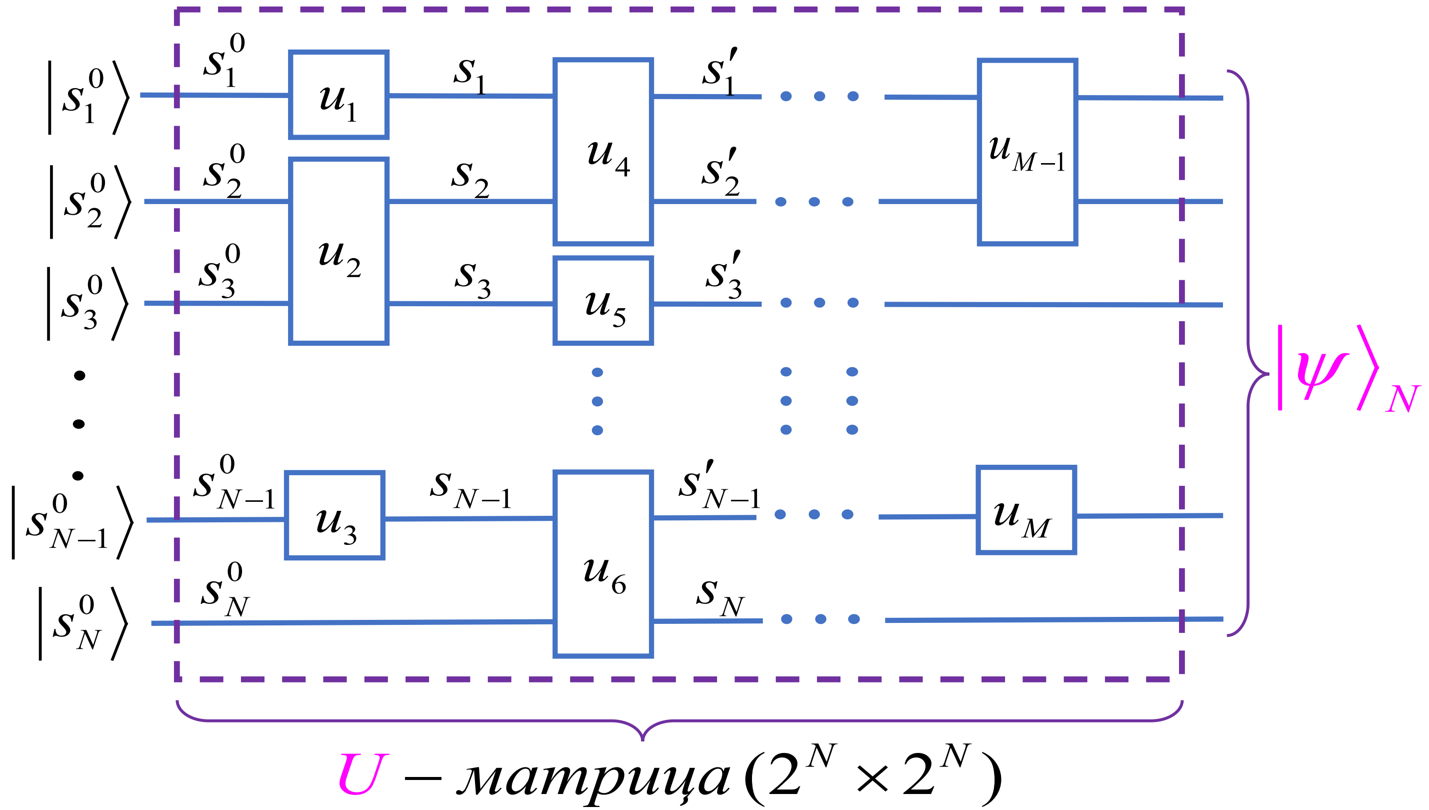
19 марта 2025

План:

1. От квантовой схемы к тензорной сети
2. Тензорная сеть для спиновой модели: основные определения
3. Тензорная сеть: графическое представление
   a) MPS – тензорное представлении векторов квантового состояния
   b) MPO – тензорное представление оператора
4. Временная эволюция замкнутой квантовой системы
5. Унитарная эволюция спиновой системы
6. Квантовое моделирование динамики в режиме закалки в изолированных системах

1. От квантовой схемы к тензорной сети

$$\left|\psi\right\rangle_N = U\left|\psi^{(0)}\right\rangle_N, \qquad \left|\psi\right\rangle_N = \sum_{\{s_i\}} \psi_{s_1 s_2 \ldots s_N} \left|s_1 s_2 \ldots s_N\right\rangle, \qquad s_i = \{0,1\}$$

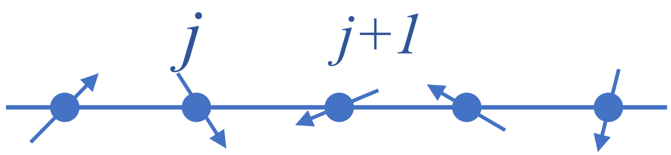


$$U = \prod_{k=1}^{M} u_k = \left(u_M u_{M-1}\right)\ldots\left(u_6 u_5 u_4\right)\left(u_3 u_2 u_1\right),$$

$\left[u_1\right]_{s_1 s_1^0}$, $\quad \left[u_2\right]_{s_3 s_2, s_3^0 s_2^0}$ и т.д.

2. Тензорная сеть для спиновой модели: основные определения

Одномерная спиновая (s=1/2) модель с АФМ взаимодействием:



$$H_{\mathrm{XXZ}} = J\sum_j \left(\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y\right) + J_z \sum_j \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z$$

Тензорное представление модели:

MPS (matrix product states) **/ MPO** (matrix product operators)

$$\left|\psi\right\rangle_N = \sum_{\{s_i=0,1\}} \psi_{s_1 s_2 \ldots s_N} \left|s_1 s_2 \ldots s_N\right\rangle,$$

$$\psi^{\mathrm{MPS}}_{s_1 s_2 \ldots s_{N-1} s_N} = \sum_{a_1 \ldots a_N} A^{[1]}_{s_1, a_1} A^{[2]}_{s_2, a_1 a_2} \ldots A^{[N-1]}_{s_{N-1}, a_{N-2} a_{N-1}} A^{[N]}_{s_N, a_{N-1}},$$

$$A^{[j]}_{s_j, a_{j-1} a_j} \equiv A^{s_j}_{a_{j-1} a_j}$$

Индексы: $s_j (= 0, 1)$ - физические,

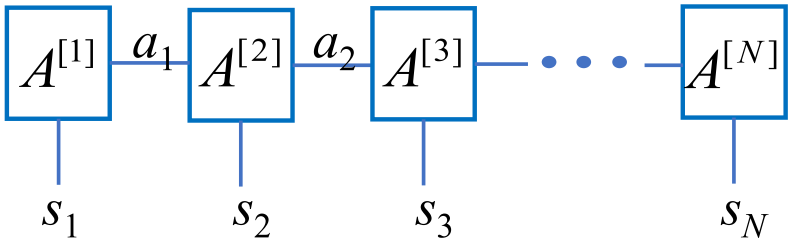
$a_j (= 1, 2, \ldots \chi)$- геометрические или виртуальные.

Для фиксированного s_j : $\left[A^{s_j}_{a_{j-1} a_j} \right]$ - матрица $(\chi \times \chi)$, где χ - размерность связи

Полное число параметров 2^N в $\psi_{\{s_j\}}$ редуцируется до $2N\chi^2$ в $\psi^{\mathrm{MPS}}_{\{s_j\}}$

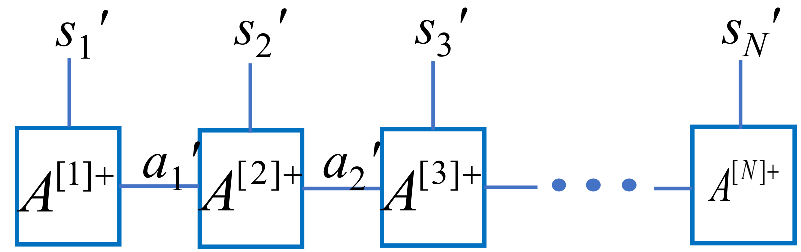
3. Тензорная сеть: графическое представление

а) вектор квантового состояния в $\mathcal{H}_2^{\otimes N}$ в представлении MPS (matrix product states):

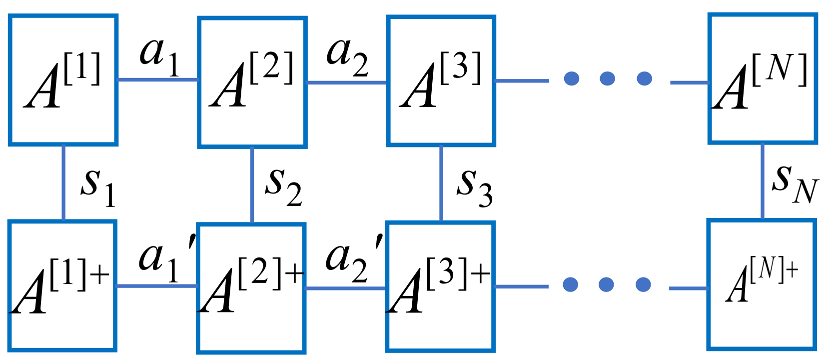


$$= \left|\psi\right\rangle_N$$

$$_N\left\langle\psi\right| =$$



Скалярное произведение и нормировка:

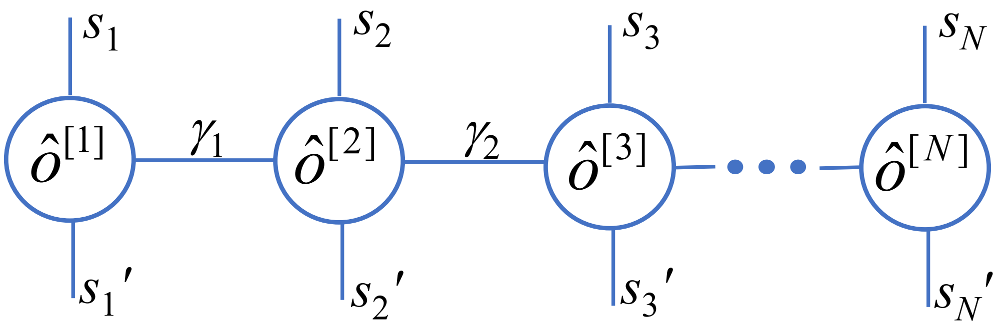


$$= {}_N\left\langle\psi\middle|\psi\right\rangle_N = 1$$

3. Тензорная сеть: графическое представление

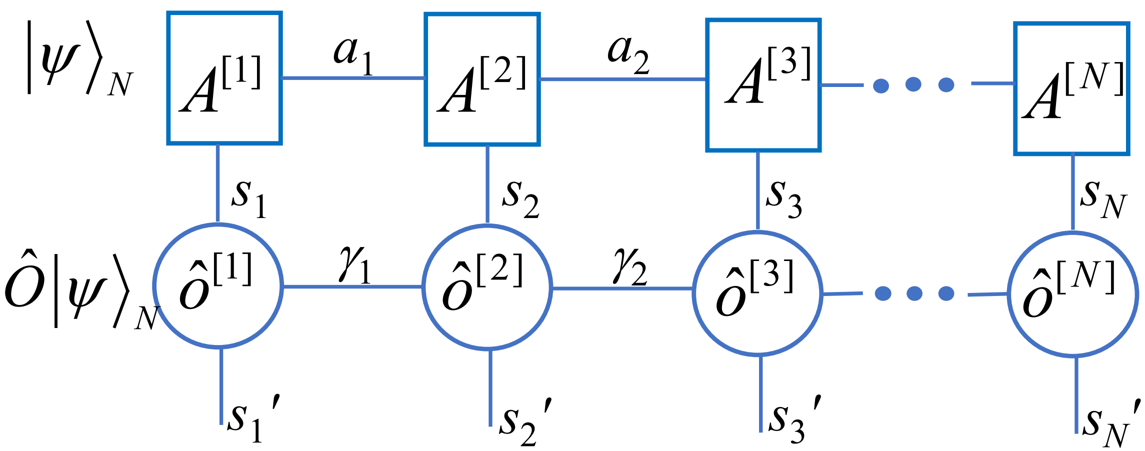
b) MPO (matrix product operator) – тензорное представление оператора:

$$\hat{O} = \sum_{\{s_j\}} \sum_{\{s_j'\}} \left| s_1 s_2 \ldots s_N \right\rangle O_{s_1 s_2 \ldots s_N, s_1' s_2' \ldots s_N'} \left\langle s_1' s_2' \ldots s_N' \right|$$



$$\hat{O} \sim \prod_{j=1}^{N} \hat{o}^{[j]}, \quad \gamma_j = 1, 2, \ldots w$$

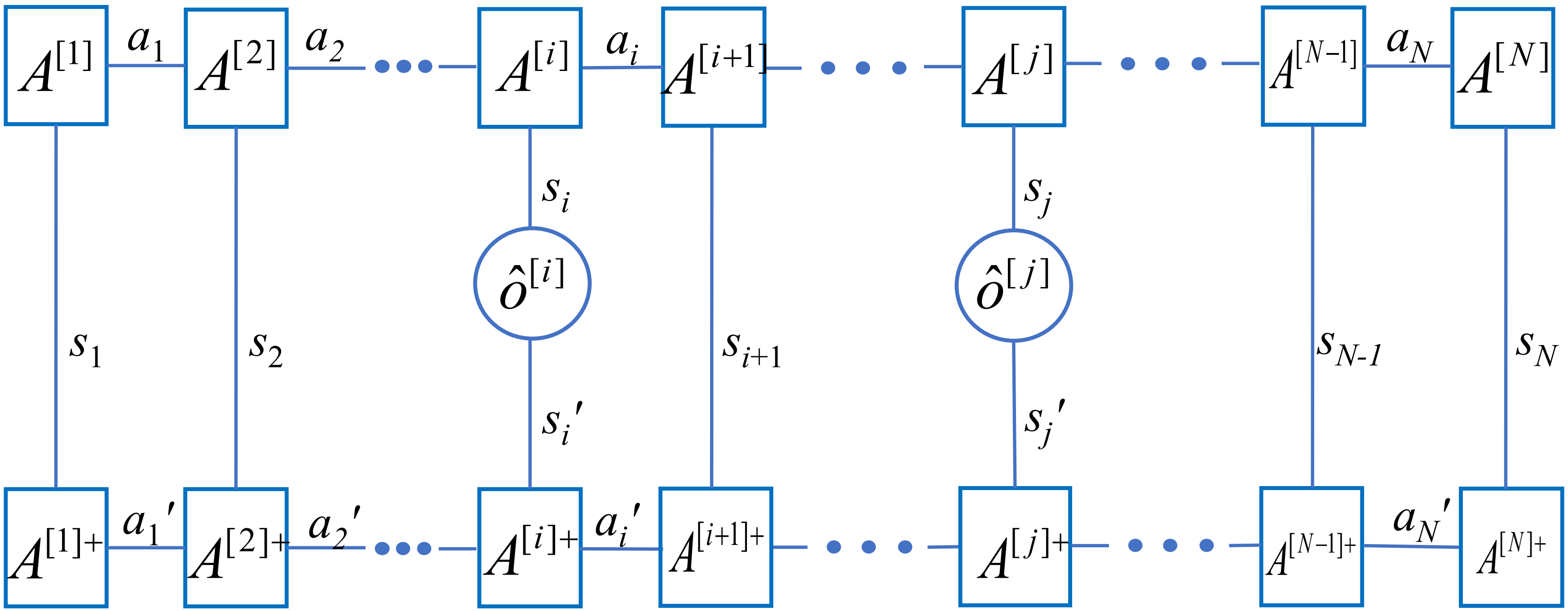
Действие оператора $\hat{O}$ на вектор $|\psi\rangle_N$:



Среднее значение оператора $\hat{O}$ по состоянию $|\psi\rangle_N$:

пусть $\hat{O} \sim \hat{o}^{[i]}\hat{o}^{[j]}$

$${}_N\langle\psi|\hat{o}^{[i]}\hat{o}^{[j]}|\psi\rangle_N =$$



4. Временная эволюция замкнутой квантовой системы

Два способа описания квантовой динамики замкнутой системы взимодействующих частиц:

1) решение уравнения Шредингера:

$$\frac{\partial\left|\psi(t)\right\rangle}{\partial t}=\hat{H}\left|\psi(t)\right\rangle \quad \Longrightarrow \quad \left|\psi(t)\right\rangle=e^{-i\hat{H}t}\left|\psi(0)\right\rangle, \quad (\hbar=1)$$

2) решение квантового уравнения Лиувилля для матрицы плотности:

$$i\frac{\partial\hat{\rho}(t)}{\partial t}=\left[\hat{H},\hat{\rho}(t)\right] \quad \Longrightarrow \quad \hat{\rho}(t)=e^{-i\hat{H}t}\hat{\rho}(0)e^{i\hat{H}t}$$

Для чистого квантового состояния: $\hat{\rho}(0)=\left|\psi(0)\right\rangle\left\langle\psi(0)\right|$, оба способа эквивалентны и $\left\langle\psi(t)\right|\hat{O}\left|\psi(t)\right\rangle=\mathrm{Tr}\left[\hat{\rho}(t)\hat{O}\right]$

Нас интересует унитарная эволюция для замкнутой системы без диссипации:

$$\left|\psi(0)\right\rangle \xrightarrow{\hat{U}(t)=e^{-i\hat{H}t}} \left|\psi(t)\right\rangle$$

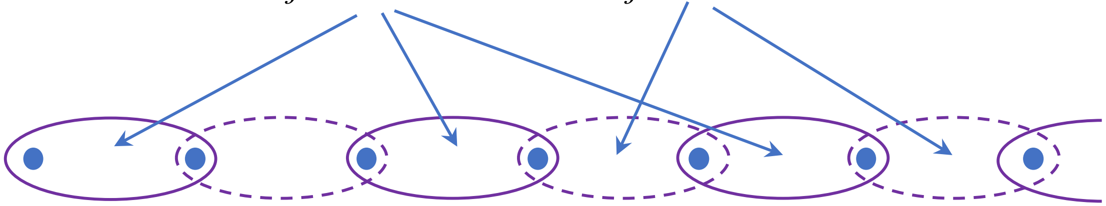
5. Унитарная эволюция спиновой системы

Для спиновой XXZ модели:

$$H_{\mathrm{XXZ}} = J\sum_{j=1}^{N}\left(S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y + gS_j^z S_{j+1}^z\right)$$

разобьем сумму на нечетные и четные пары связей:

$$H_{\mathrm{XXZ}} = \sum_{j\in \text{нечетн}} \hat{h}_{j,j+1} + \sum_{j\in \text{четн}} \hat{h}_{j,j+1} \equiv \hat{H}_1 + \hat{H}_2$$



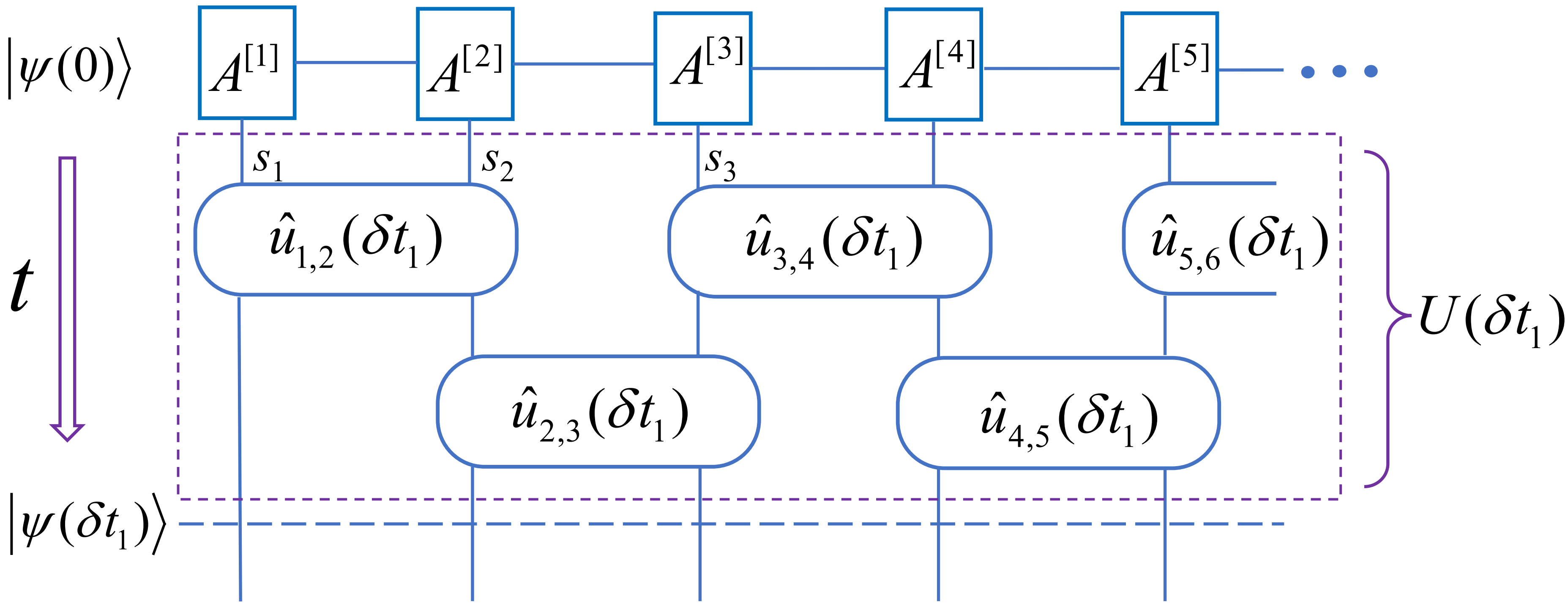
учтем, что внутри каждой из сумм $\hat{h}_{j,j+1}$ коммутируют , но $\left[\hat{H}_1, \hat{H}_2\right] \neq 0$.

Разобьем время эволюции t на большое число шагов: $\mathcal{N} = t/\delta t$

$$e^{-i\hat{H}t} = e^{-i\hat{H}\sum_{n=1}^{\mathcal{N}}\delta t_n} = \prod_{n=1}^{\mathcal{N}} e^{-i\hat{H}\delta t_n} = \prod_{n=1}^{\mathcal{N}} \hat{U}(\delta t_n)$$

$$\hat{U}(\delta t_n) = e^{-i\left(\hat{H}_1+\hat{H}_2\right)\delta t_n} \approx e^{-i\hat{H}_1\delta t_n} e^{-i\hat{H}_2\delta t_n} = \prod_{j\in \text{нечетн}} \hat{u}_{j,j+1}(\delta t_n) \prod_{j\in \text{четн}} \hat{u}_{j,j+1}(\delta t_n)$$

приближение Сузуки-Троттера



На каждом троттеровском шаге δt_n выполняется операция

$$\hat{U}(\delta t_n) \approx \prod_{j\in нечетн} \hat{u}_{j,j+1}(\delta t_n) \prod_{j\in четн} \hat{u}_{j,j+1}(\delta t_n)\,,$$

графически обозначена выделенным блоком.

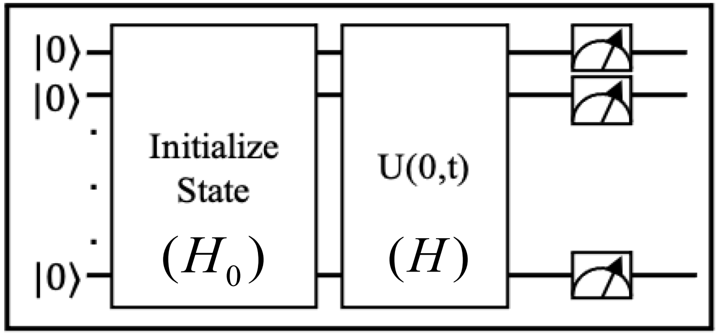
Полная унитарная эволюция $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle$ сведена к последовательному выполнению $\mathcal{N} = t/\delta t$ идентичных операций $\hat{U}(t) = \prod_{n=1}^{\mathcal{N}} \hat{U}(\delta t_n)$.

6. Моделирование неравновесной динамики спиновой системы в режиме «закалки»

Закалка происходит в материале при резком (неадиабатическом) изменении:

(**а**) его окружения (т. е. внешнего статического поля);

(**б**) значения параметров модели.



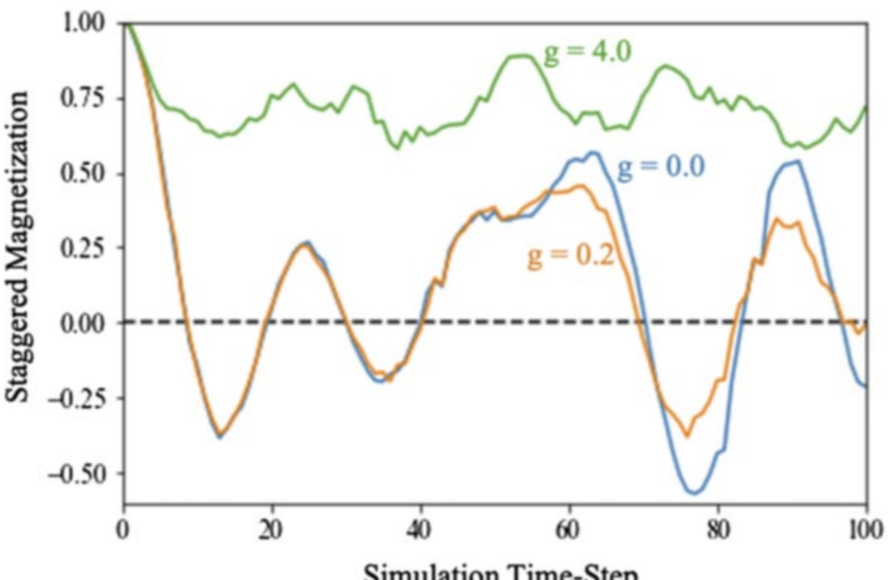
(t >0) $H = H_0 + \Delta H = \sum_{l=1}^{L} H_l$

Динамика XXZ-модели со спином 1/2

$$H(t) = J\sum_{i=1}\left(\sigma_i^x\sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y\sigma_{i+1}^y + g\sigma_i^z\sigma_{i+1}^z\right)$$

$$|\psi_0\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow \ldots . \downarrow\uparrow\downarrow\rangle$$

$$m_s(t) = \frac{1}{N}\sum_i (-1)^i \langle \sigma_i^z(t)\rangle$$



Параметр анизотропии g запускает квантовый фазовый переход между

- фазой «жидкость Латтинжера» ($0 < g < 1$) и
- Изинг-упорядоченной АФМ фазой, ($g > 1$).

(L. Oftelie, et al., Quant. Sci & Tech., 2021)

V.I. Yukalov. *Equilibration and thermalization in finite quantum systems.* Laser Phys. Lett. 8, 485 (2011).

Для квантового статистического ансамбля $\{\mathcal{F}, \hat{\rho}(t)\}$ существует два общих сценария:

$$(*)\quad \lim_{t\to\infty}\{\mathcal{F}, \hat{\rho}(t)\} \begin{cases} \nearrow \{\mathcal{F}, \rho^*(\mathcal{A}_0)\} - \text{equilibration} \\ \searrow \{\mathcal{F}, \rho^*\} - \text{thermalization} \end{cases}$$

(достижение равновесного состояния с *частичным сохранением* начальных характеристик)

(достижение равновесного состояния *близкого к распределению Гиббса*)

$$\mathcal{A}_0 \equiv \left\{\left\langle \hat{A}(0)\right\rangle\right\}, \quad \text{и} \quad \left\langle \hat{A}(t)\right\rangle = \mathrm{Tr}\hat{A}\hat{\rho}(t).$$

Можно ли все это увидеть из унитарной временной эволюции изолированной низкоразмерной системы со спином 1/2?

R. Jensen and R. Shankar,
Statistical Behavior in Deterministic Quantum Systems with Few Degrees of Freedom. Phys.Rev.Lett. 1985.

Рассмотрим решение квантового уравнения Лиувилля:

$$\frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = -i\left[H, \hat{\rho}(t)\right]; \qquad \hat{\rho}(0) = \left|\psi_0\right\rangle\left\langle\psi_0\right| \equiv \hat{\rho}^{\psi_0} \qquad \left|\psi_0\right\rangle = \left|\uparrow\downarrow\uparrow \ldots .\downarrow\uparrow\downarrow\right\rangle$$

$$H = H_{XXZ} = J\sum_j \left[\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + g\sigma_j^z \sigma_{j+1}^z\right] \qquad (g \geq 0)$$

Рассмотрим временную эволюцию АФМ параметра порядка:

$$\left\langle \hat{m}_{\mathrm{s}}(t)\right\rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{m}_s \hat{\rho}(t)\right); \qquad \hat{m}_{\mathrm{s}} = \frac{1}{N}\sum_j (-1)^j \hat{\sigma}_j^z$$

и временную зависимость продольного коррелятора:

$$G^{zz}(l,t) = \frac{1}{N}\sum_j \left[\left\langle \hat{\sigma}_{j+l}^z(t)\hat{\sigma}_j^z(t)\right\rangle - \left\langle \hat{\sigma}_{j+l}^z\right\rangle\left\langle \hat{\sigma}_j^z\right\rangle\right]$$

Три равновесные фазы :

$$(i) \qquad g = 0, \qquad H_{XX} = \frac{J}{2}\sum_j \left[c_j^+ c_{j+1} + c_{j+1}^+ c_j \right]$$

свободные бесспиновые фермионные квазичастицы;

$$(ii) \qquad 0 < g < 1, \qquad H_{XXZ} = H_{XX} + gJ\sum_j c_j^+ c_j c_{j+1}^+ c_{j+1}$$

взаимодействующие квазичастицы;

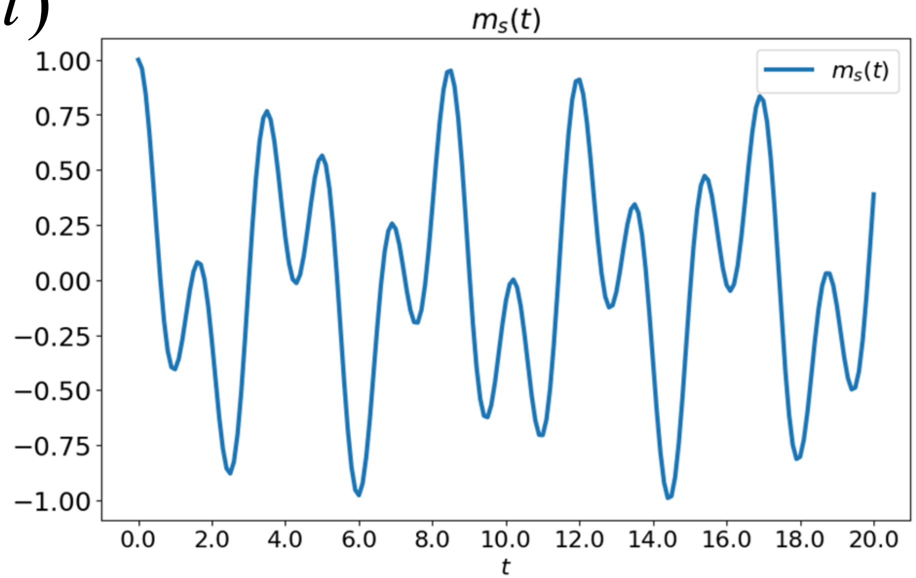
(iii) при g=1, квантовый фазовый переход в Изинг- упорядоченное АФМ состояние для $g > 1$.

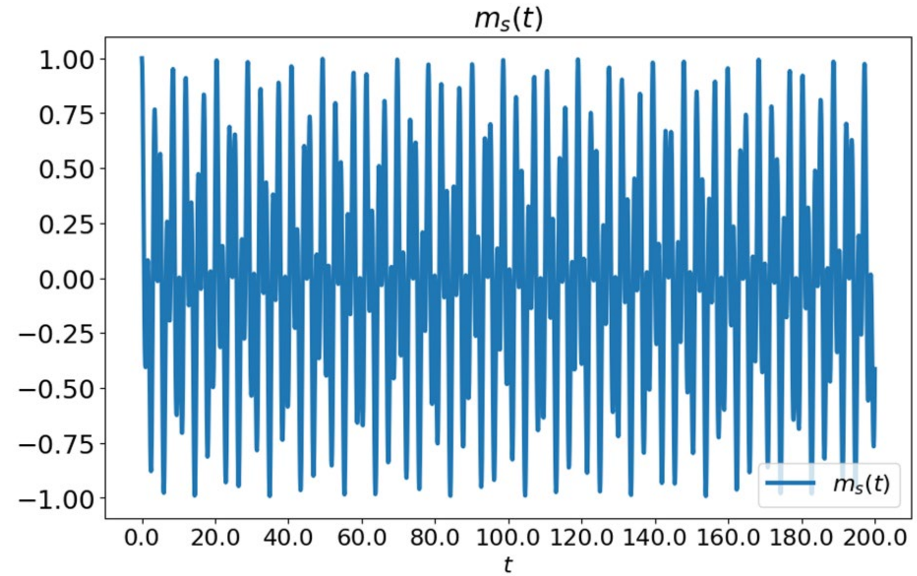
$$H = H_{XXZ} = J\sum_j \left[\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + g\sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \right]$$

(*i*) g=0

$$[t] = \hbar / J$$

$m_s(t)$



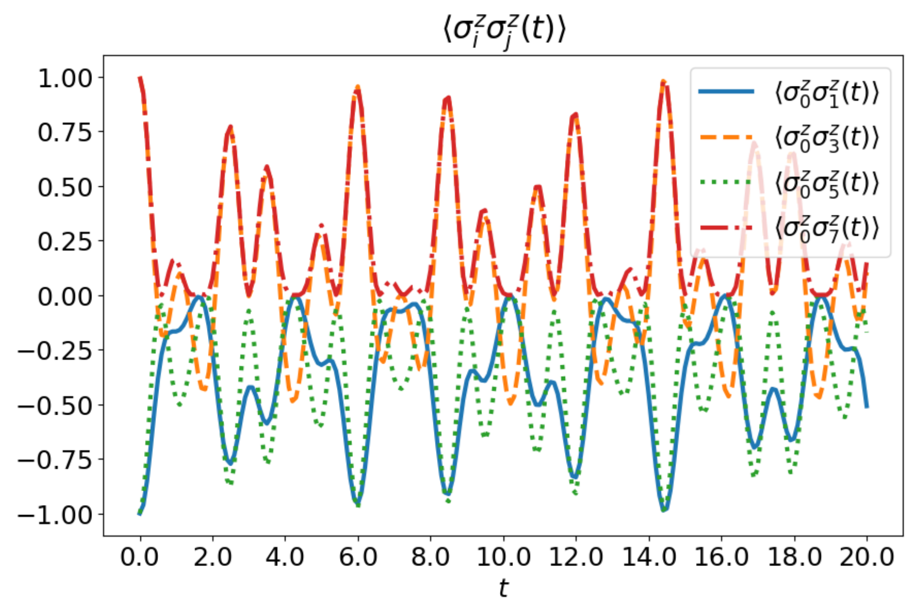


- Колебания с несколькими дискретными (n=1,2,3) частотами

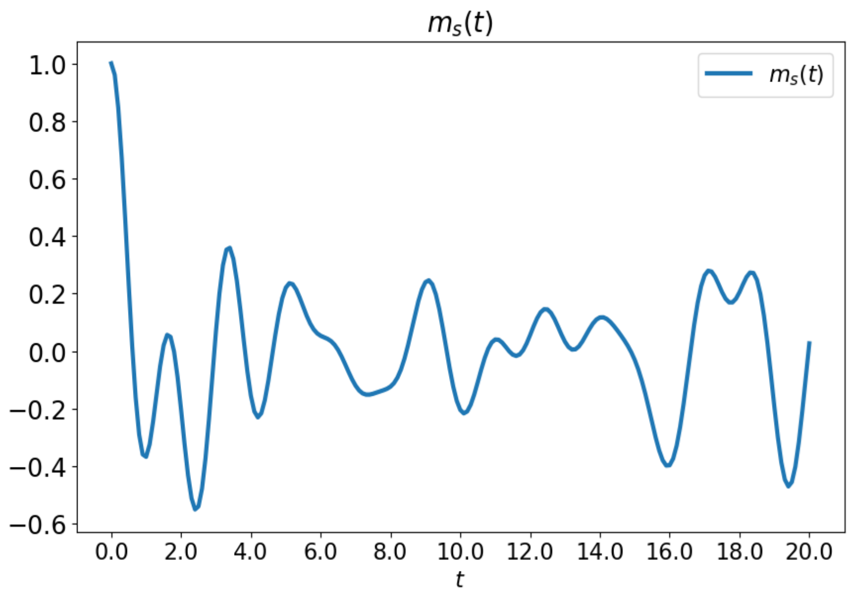
$$\omega_n \approx nJ$$

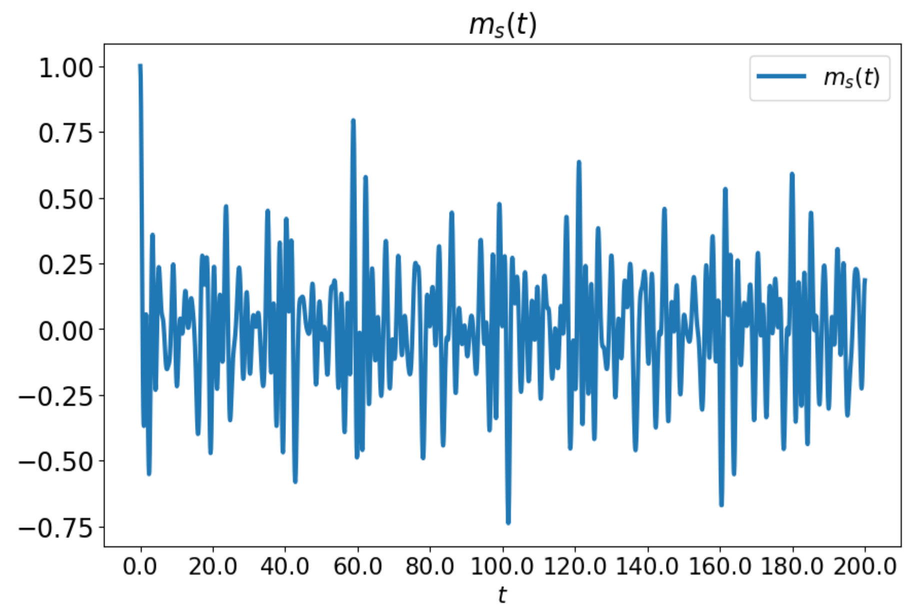
- Отсутствие видимых признаков распада в течение длительного времени.

- Суперпозиция АФМ и ФМ корреляций.



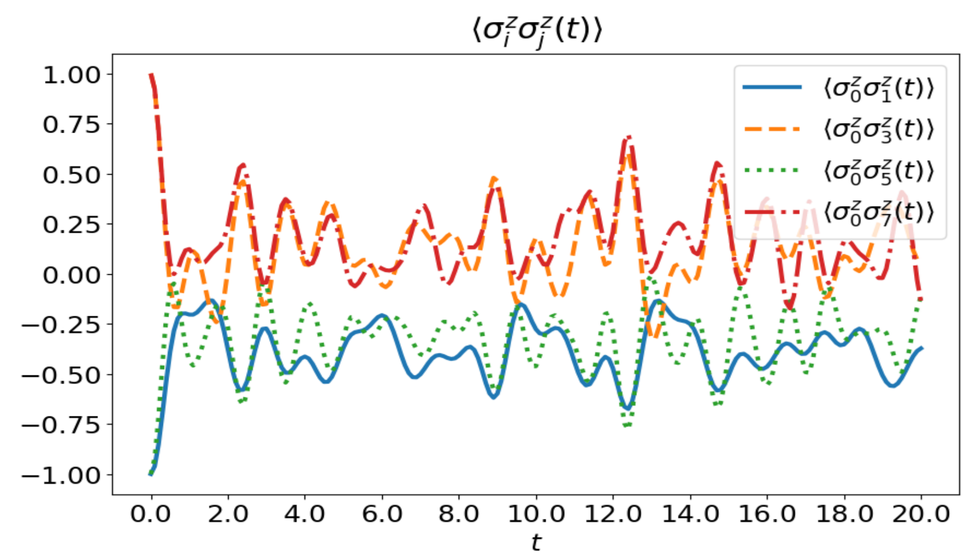
(ii) $g = 0.4$





Аналогичные свойства, как и для g=0, однако:

- сильное подавление в начальный переходный период,
- ослабление AFM и FM корреляций



$$E^g = \langle \psi_0 | \hat{H}(g) | \psi_0 \rangle = \sum_n E_n \left| \langle \psi_0 | n \rangle \right|^2 \qquad \boxed{\hat{H} | n \rangle = E_n | n \rangle}$$

$$\langle \hat{m}_s(t) \rangle = \mathrm{Tr}\left[\hat{m}_s \hat{\rho}(t) \right] = \sum_n \rho_{nn}^{\psi_0} \langle n | \hat{m}_s | n \rangle + \sum_{k \neq n} \rho_{kn}^{\psi_0} \langle n | \hat{m}_s | k \rangle e^{i(E_n - E_k)t},$$

$\rho_{kn}^{\psi_0} \equiv \langle k | \psi_0 \rangle \langle \psi_0 | n \rangle$ перекрытие $|\psi_0\rangle$ с $\{|n\rangle\}$.

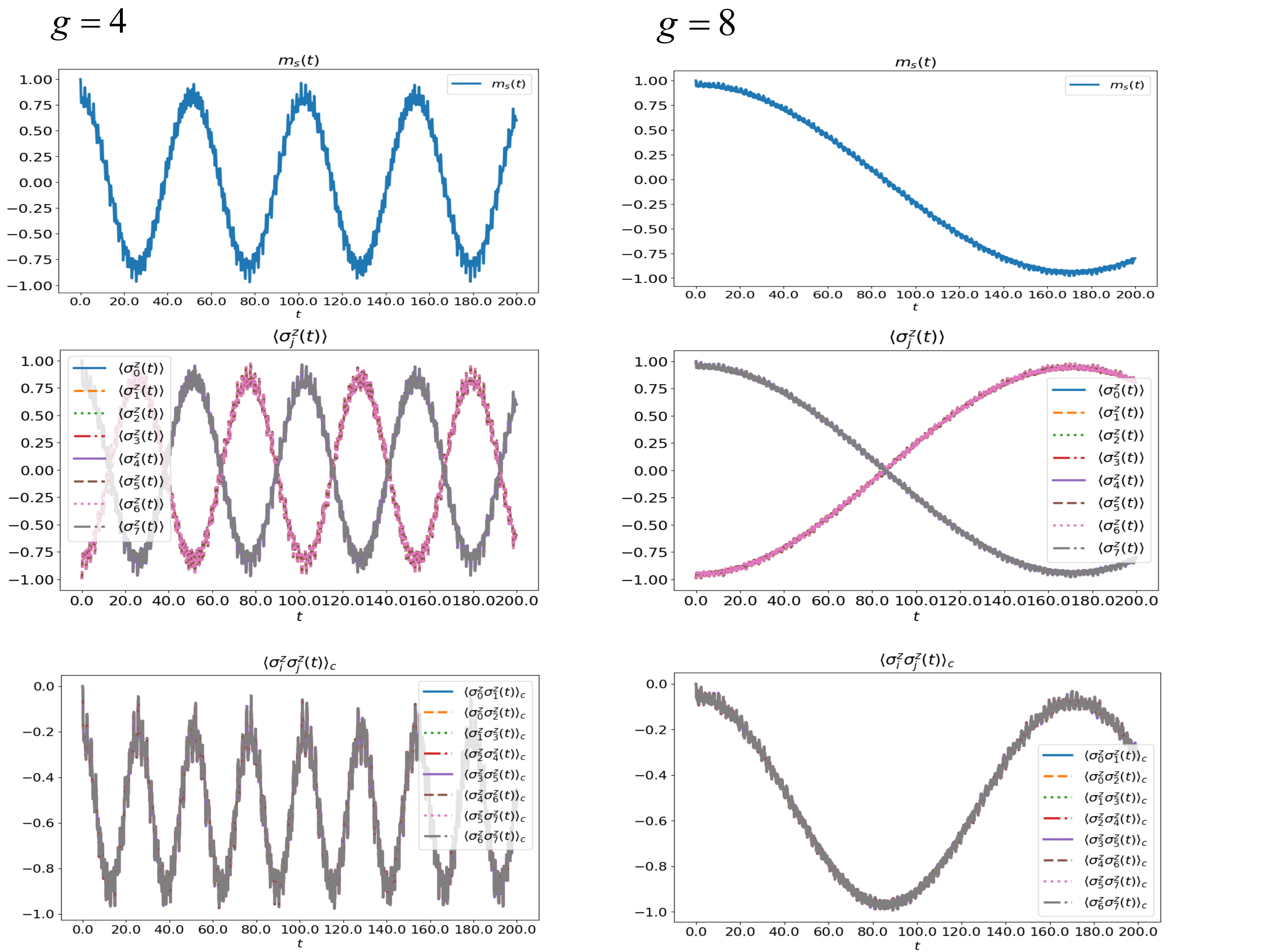
Конечная квантовая система, полностью изолированная от своего окружения, не имеет абсолютного равновесия в пределе $t \to \infty$ (*).

- Среднее по времени (по фон Нейману)

$$\overline{m_s(t)} = \frac{1}{t} \int_0^t dt' m_s(t') \xrightarrow[(Jt) > (Jt)_{\mathrm{relax}}]{} \bar{m}_s$$

для $g \sim 0.4, \quad (Jt)_{\mathrm{relax}} \leq 5.$

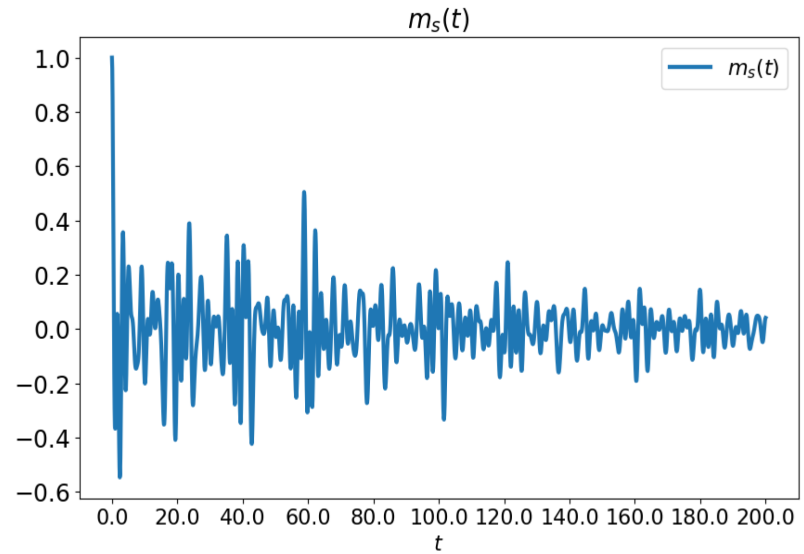
- Однако, для $g > 1, \quad (Jt)_{\mathrm{relax}} \gg 1$

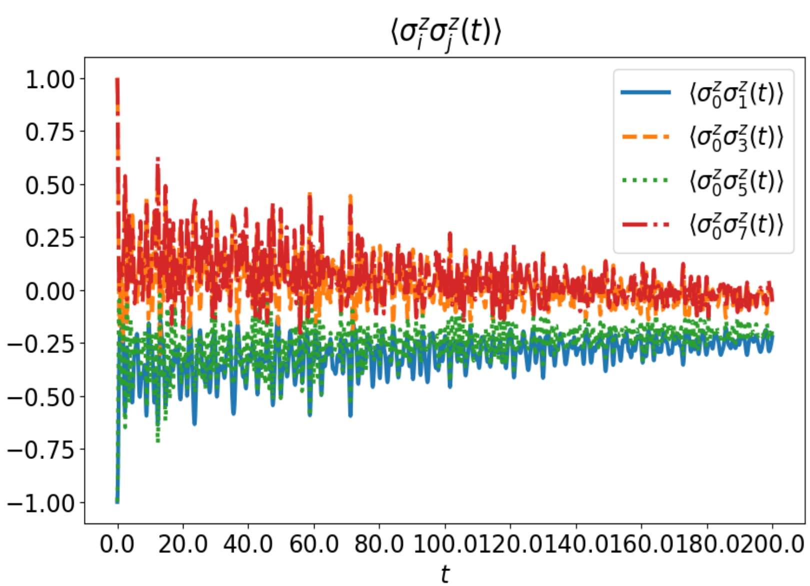


$g = 4$
$g = 8$
$m_s(t)$
$\langle \sigma_j^z(t) \rangle$
$\langle \sigma_0^z(t) \rangle$
$\langle \sigma_1^z(t) \rangle$
$\langle \sigma_2^z(t) \rangle$
$\langle \sigma_3^z(t) \rangle$
$\langle \sigma_4^z(t) \rangle$
$\langle \sigma_5^z(t) \rangle$
$\langle \sigma_6^z(t) \rangle$
$\langle \sigma_7^z(t) \rangle$
$\langle \sigma_i^z \sigma_j^z(t) \rangle_c$
$\langle \sigma_0^z \sigma_1^z(t) \rangle_c$
$\langle \sigma_0^z \sigma_2^z(t) \rangle_c$
$\langle \sigma_1^z \sigma_3^z(t) \rangle_c$
$\langle \sigma_2^z \sigma_4^z(t) \rangle_c$
$\langle \sigma_3^z \sigma_5^z(t) \rangle_c$
$\langle \sigma_4^z \sigma_6^z(t) \rangle_c$
$\langle \sigma_5^z \sigma_7^z(t) \rangle_c$
$\langle \sigma_6^z \sigma_7^z(t) \rangle_c$
t

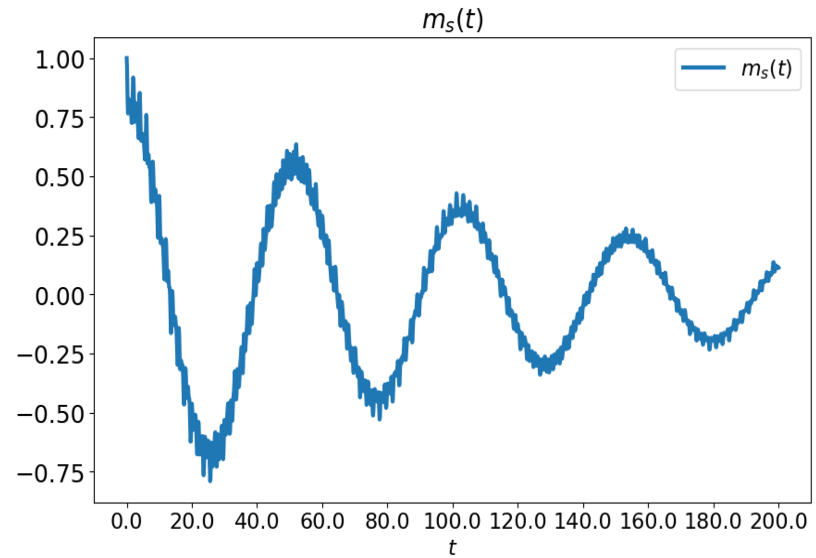
Включение дефазирующего шума за счет влияния окружения, $\gamma = 0.001$

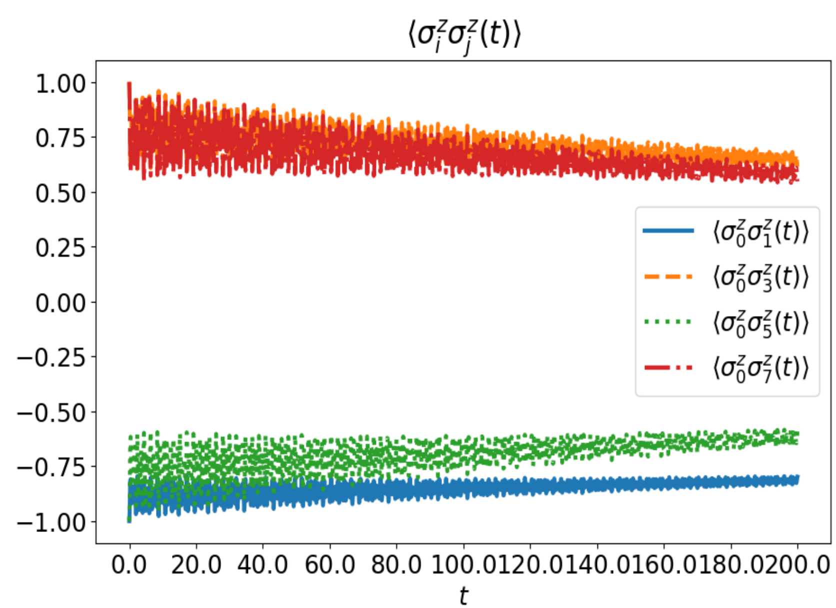
$g = 0.4$





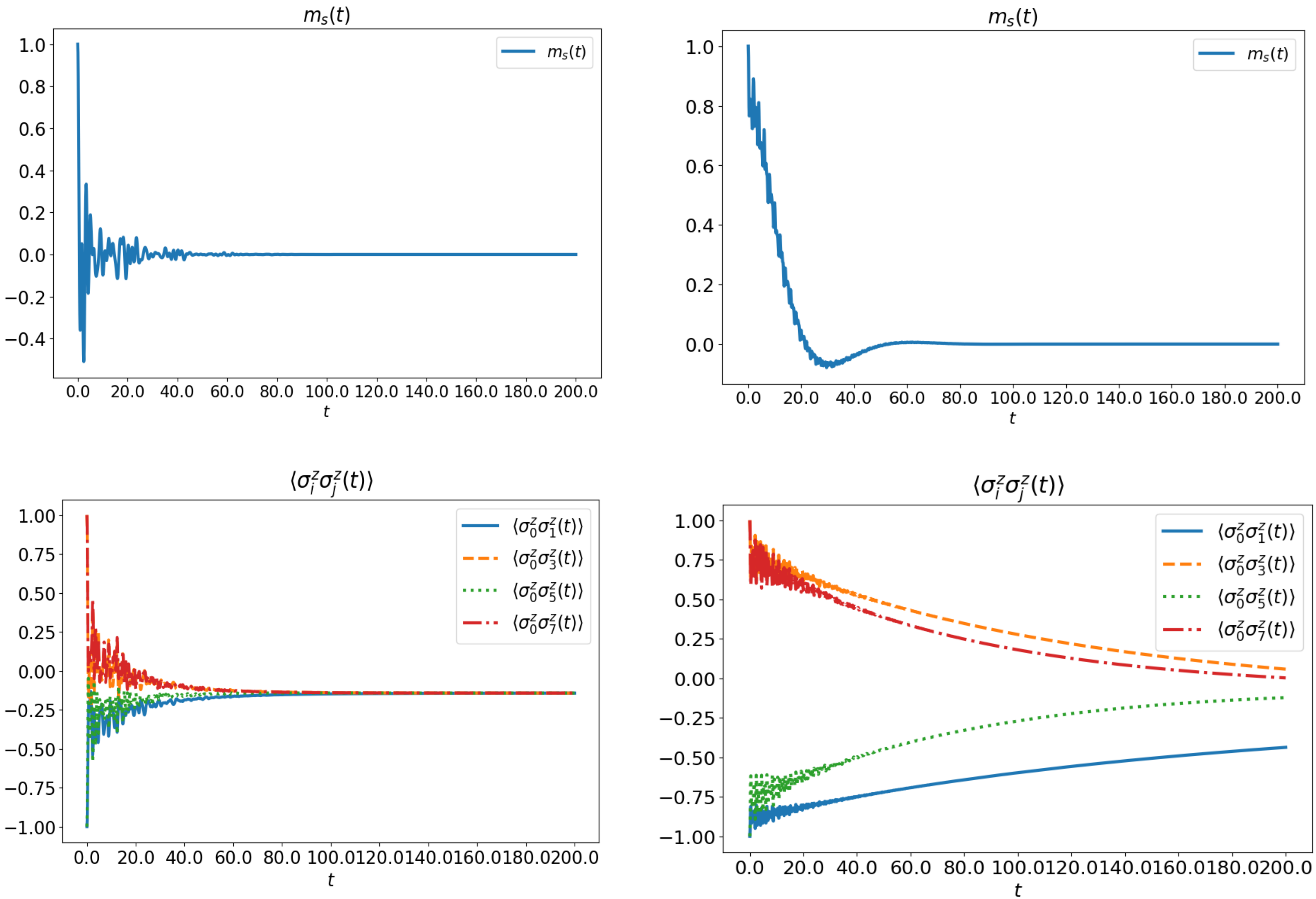
$g = 4$





$\gamma = 0.01$

$g = 0.4$ $g = 4$



Выводы и перспективы:

- Перспективы создания квантовых цифровых компьютеров следующего поколения открывают новые возможности для изучения неравновесной квантовой динамики конечных квантовых систем, изолированных от окружающей среды. Эта динамика раскрывает новую физику за пределами низкоэнергетических свойств, которые обычно актуальны в твердотельных многочастичных системах.
- Для конечной (N=8) XXZ спиновой модели со спином 1/2, были изучены общие свойства динамики в режиме «закалки», чтобы выявить резкое изменение динамического поведения при переходе через значение параметра изинговского взаимодйствия $g = 1$. Это, вероятно, предшественник гипотетического динамического фазового перехода, который происходит при $g = 1$ в термодинамическом пределе.

Благодарю за внимание