ТВЕРСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Направление 02.03.01 Математика и Компьютерные науки
Профиль «Математическое и компьютерное моделирование»

Алешин Дмитрий Алексеевич

ВЫЧИСЛЕНИЕ ОПЕРАТОРНЫХ ЭКСПОНЕНТ В БАЗИСЕ ПАУЛИ

Научный руководитель: д. ф.-м. н. А. Н. Цирулёв

Тверь 2023

Цели и задачи работы

Цель работы — изучить свойства операторной экспоненты для трехкубитных квантовых систем и разработать алгоритмы её вычисления с помощью разложения генерирующего оператора.

Задачи:

- Изучить основные свойства базиса Паули
- Рассмотреть возможные типы однородных трехкубитных гамильтонианов
- Разработать алгоритм вычисления операторной экспоненты для трёх кубитов в базисе Паули

Актуальность

Теория квантовых вычислений продолжает быть актуальной на протяжении последних двух десятилетий.
Различные типы и подтипы квантовых вычислений адаптированы для различных технологий и аппаратных архитектур, но их математические структуры построены с использованием одних и тех же базовых понятий гильбертова пространства, квантовой наблюдаемости, унитарного оператора и квантового состояния.

Операторная экспонента и базис Паули

Операторная экспонента используется в квантовой механике для описания эволюции квантовых систем во времени. Формула для вычисления операторной экспоненты через ряд Маклорена:

$$\mathrm{e}^{\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{A}^n, \tag{1}$$

где $\hat{A}$ - оператор, а $\hat{A}^n$ - его n-ая степень.

Базис Паули $P(\mathcal{H}_n)$ в $L(\mathcal{H}_n)$ (гильбертовом пространстве) определён как

$$\{\hat{\sigma}_{k_1 \ldots k_n}\}_{k_1,\ldots,k_n \in \{0,1,2,3\}}, \quad \hat{\sigma}_{k_1 \ldots k_n} = \hat{\sigma}_{k_1} \otimes \ldots \otimes \hat{\sigma}_{k_n}, \tag{2}$$

где $\hat{\sigma}_{0\ldots0}$ — тождественный оператор. $P(\mathcal{H}_n)$ состоит из 4^n элементов. В (2) $k_1 \ldots k_n$ — строка Паули, $k_1, \ldots, k_n \in \{0, 1, 2, 3\}$. Для строк Паули мы будем использовать сокращённую запись $\hat{\sigma}_K = \hat{\sigma}_{k_1,\ldots,k_n \in \{0,1,2,3\}}$, где K — десятичное представление числа $k_1 \ldots k_n$, заданного в системе счисления по основанию 4.

Матрицы и операторы Паули

Пусть $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ являются ортонормированным базисом в некотором однокубитном пространстве в $\mathcal{H}$. Единичная матрица и матрицы Паули

$$\hat{\sigma}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{3}$$

определим четыре оператора Паули

$$\begin{gathered} \hat{\sigma}_0 = |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|, \quad \hat{\sigma}_1 = |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|, \\ \hat{\sigma}_2 = -i|0\rangle\langle 1| + i|1\rangle\langle 0|, \quad \hat{\sigma}_3 = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|, \end{gathered} \tag{4}$$

которые эрмитовы и унитарны одновременно.

Общий вид гамильтониана

Общий вид гамильтониана выглядит следующим образом:

$$\hat{H} = \sum_{i,j,k \in \{0,1,2,3\}} h_{ijk} \hat{\sigma}_{ijk}. \tag{5}$$

Но мы будем рассматривать специальный случай, когда гамильтониан состоит из трёх слагаемых и выглядит следующим образом:

$$\hat{H} = a\hat{\sigma}_A + b\hat{\sigma}_B + c\hat{\sigma}_C, \tag{6}$$

где a, b, c — некоторые коэффициенты, а $\hat{\sigma}_A, \hat{\sigma}_B, \hat{\sigma}_C$ — операторы Паули.

Классификация гамильтонианов:

1. $[\hat{\sigma}_A, \hat{\sigma}_B] = [\hat{\sigma}_A, \hat{\sigma}_C] = [\hat{\sigma}_B, \hat{\sigma}_C] = 0$
2. $\{\hat{\sigma}_A, \hat{\sigma}_B\} = \{\hat{\sigma}_A, \hat{\sigma}_C\} = \{\hat{\sigma}_B, \hat{\sigma}_C\} = 0$
3. $\{\hat{\sigma}_A, \hat{\sigma}_B\} = 0, \quad [\hat{\sigma}_A, \hat{\sigma}_C] = [\hat{\sigma}_B, \hat{\sigma}_C] = [\hat{\sigma}_A + \hat{\sigma}_B, \hat{\sigma}_C] = 0$
4. $[\hat{\sigma}_A, \hat{\sigma}_B] = 0, \quad \{\hat{\sigma}_A, \hat{\sigma}_C\} = \{\hat{\sigma}_B, \hat{\sigma}_C\} = 0$

Вычисление композиции двух операторов Паули

Для вычисления композиции двух операторов Паули $\hat{\sigma}_K$ и $\hat{\sigma}_L$ используется формула:

$$\hat{\sigma}_K \hat{\sigma}_L = \omega \hat{\sigma}_M, \tag{7}$$

где $\hat{\sigma}_M$ — искомый оператор композиции, ω — это i или $-i$, которая вычисляется по формуле:

$$\omega = (i)^{p+m}(-1)^m, \tag{8}$$

где p - количество соответствий 1-2, 2-3, 3-1, а m - количество соответствий 2-1, 2-3, 1-3.

Алгоритм вычисления композиции двух операторов Паули и степеней гамильтониана

Для вычисления композиции двух операторов Паули был реализован класс *Calculation*, который содержит следующие методы:

- *PauliMatrices* — рассчитывает $\hat{\sigma}_M$, используя формулу (7);
- *Operations* — вычисляет $\hat{\sigma}_{ijk}$;
- *Factors* — рассчитывает ω, используя формулу (8).

Для вычисления степеней гамильтониана был реализован класс *Hamiltonian*, который состоит из методов:

- *CountingOperators* — рассчитывает композицию операторов после композиции;
- *CalculateSecondDegreeOfHamiltonian* — вычисляет вторую степень гамильтониана по формуле

$$H^2 = \hat{\sigma}_0 + 2ab\hat{\sigma}_A\hat{\sigma}_B;$$

- *CalculateThirdDegreeOfHamiltonian* — вычисляет третью степень гамильтониана по формуле

$$H^3 = H + 2ab^2\hat{\sigma}_A + 2a^2b\hat{\sigma}_B + 2abc\hat{\sigma}_A\hat{\sigma}_B\hat{\sigma}_C.$$

Входные данные и демонстрация работы программы

Входные данные для работы программы подразумевают коэффициенты операторов Паули

$$a, \quad b, \quad c$$

и индексы операторов Паули

$$\hat{\sigma}_A, \quad \hat{\sigma}_B, \quad \hat{\sigma}_C.$$

```
Введите коэффициент первого слагаемого гамильтониана: 1
Введите индексы первого оператора Паули: 213
Введите коэффициент второго слагаемого гамильтониана: 2
Введите индексы второго оператора Паули: 312
Введите коэффициент третьего слагаемого гамильтониана: 3
Введите индексы третьего оператора Паули: 132
Введённый вами гамильтониан: H = 1*σ_213 + 2*σ_312 + 3*σ_132
H^2 = σ_000 + 4*i*σ_101
H^3 = H + 8*σ_213+16*σ_312 + 12*i*σ_033
```

Скриншот выполнения программы

Заключение

В работе получены следующие основные результаты:

- Изучены свойства базиса Паули
- Рассмотрены возможные типы однородных трехкубитных гамильтонианов
- Разработан алгоритм вычисления операторной экспоненты для трёх кубитов в базисе Паули на языке C#