2 слайд

Целью данной выпускной квалификационной работы является изучение свойства операторной экспоненты для трёхкубитных[1] квантовых систем и разработка алгоритмов её вычисления с помощью разложения генерирующего оператора. Ну а задачи следующие:

1. Изучить основные свойства базиса Паули
2. Рассмотреть возможные типы однородных трёхкубитных гамильтонианов
3. Разработать алгоритм вычисления операторной экспоненты для трёх кубитов в базисе Паули

3 слайд

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.

4 слайд

Чтобы вычислять операторную экспоненту, надо сначала понять что такое операторная экспонента. Операторная экспонента – это математический объект, который используется в квантовой механике для описания эволюции квантовых систем во времени. Формула для вычисления операторной экспоненты через ряд Маклорена представлена на слайде под номером 1. Перейдём к базису Паули.

Определение базиса Паули в гильбертовом пространстве[2] представлено на слайде. $\hat{\sigma}_{0\ldots0}$ – тождественный оператор. Очевидно, что базис Паули состоит из 4^n элементов.

Во второй формуле $\hat{\sigma}_{k_1\ldots k_n}$ – строки Паули, где $k_1 \ldots k_n \in \{0, 1, 2, 3\}$. Для строк Паули мы будем использовать сокращённую запись, где K --- десятичное представление числа $k_1 \ldots k_n$, заданного в системе счисления по основанию 4. Далее о матрицах и операторах Паули.

5 слайд

Пусть кет векторы 0 и 1 являются ортонормированным базисом в некотором однокубитном пространстве в $\mathcal{H}$. На слайде изображены единичная матрица и матрицы Паули, а также четыре оператора Паули, которые эрмитовы[3] и унитарны[4] одновременно. Далее речь пойдёт о гамильтониане.

6 слайд

Общий вид гамильтониана выглядит следующим образом. Но мы будем рассматривать специальный случай, когда гамильтониан состоит из трёх слагаемых и выглядит следующим образом. Где a, b, c – некоторые коэффициенты, а $\hat{\sigma}_A, \hat{\sigma}_B, \hat{\sigma}_C$ – операторы Паули. Есть 4 вида гамильтонианов, первые три в рамках моей работы нас не интересуют. И вот почему. Рассмотрим, например, первый случай, когда все операторы гамильтониана коммутируют. Это значит, что после всех преобразований операторы будут приведены, как подобные слагаемые, так как $AB = BA$. Во втором случае обратная ситуация, все операторы антикоммутируют, что приводит к простому аналитическому решению. В третьем случае за счёт коммутирования операторов A и C , B и C, и суммы операторов A и B с C задача становится тривиальной. Нас интересует 4-ый вид гамильтониана, только в этом случае могут возникнуть проблемы. Он и рассматривается в рамках моей работы.

---

[1] Кубит – комплексное двумерное гильбертово пространство, а его состояние это комплексные прямые.
[2] Гильбертово пространство — обобщение евклидова пространства, допускающее бесконечную размерность и полное по метрике, порождённой скалярным произведением.
[3] Оператор называется эрмитовым, если он удовлетворяет равенству $(Ax, y) = (x, Ay)$ для всех x, y из области определения A.
[4] Унитарный оператор – ограниченный линейный оператор $U: H \to H$ на гильбертовом пространстве H, который удовлетворяет соотношению $U^*U = UU^* = I$, где U^* эрмитово сопряжённый к U оператор, и $I: H \to H$ единичный оператор.

7 слайд

Для того, чтобы рассчитать операторную экспоненту в базисе Паули, для начала нам потребуется вычислять композицию двух операторов. Вычисляется она по формуле под номером семь.

$\hat{\sigma}_M$ – искомый оператор композиции, а ω это i или $-i$, которая вычисляется по формуле 8, где p – количество соответствий 1-2, 2-3, 3-1, m – количество соответствий 2-1, 2-3, 1-3. Далее о программной реализации.

8 слайд

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

1. $PauliMatrices$ - рассчитывает $\hat{\sigma}_M$, используя формулу 7
2. $Operations$ – вычисляет $\hat{\sigma}_{ilj}$
3. $Factors$ – рассчитывает ω, используя формулу 8

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

1. $CountingOperators$ – рассчитывает композицию операторов после композиции
2. $CalculateSecondDegreeOfHamiltonian$ - вычисляет вторую степень гамильтониана по формуле (на слайде)
3. $CalculateThirdDegreeOfHamiltonian$ – вычисляет третью степень гамильтониана по формуле (на слайде)

Данные формулы были получены аналитически. Перейдём к демонстрации работы программы

9 слайд

Входные данные представляют из себя три коэффициента операторов Паули и три оператора Паули. Результатом выполнения данной программы выступят два гамильтониана, второй и третьей степени. Подведём итоги.

10 слайд

В работе были изучены свойства базиса Паули, рассмотрены возможные типы однородных трёхкубитных гамильтонианов и разработан алгоритм вычисления операторной экспоненты для трёх кубитов в базисе Паули на языке C#.

Спасибо за внимание.

Эрмитово-сопряжённый оператор – оператор, чьи матрицы комплексно сопряжены и транспонированы.

Гамильтониан – оператор полной энергии системы или фиксированный для конкретной (замкнутой) системы эрмитов оператор