

MPS et simulation quantique

Léo Durand-Köllner

Avril 2021

1 Introduction

Dans ces notes, on parle de simulation d'ordinateurs quantiques sur des ordinateurs classiques. Le but est in fine d'arriver à une simulation efficace et rapide, sans pour autant avoir une simulation parfaite comme le ferait un ordinateur quantique parfait. Les ordinateurs quantiques d'aujourd'hui sont encore très bruités et peu fiables : on est encore dans l'ère *NISQ*. En tirant parti de ces imperfections et de la décohérence, on peut accélérer la simulation des ordinateurs quantiques actuels.

2 MPS

2.1 Définition

Dans la suite, on utilise extensivement la représentation dite MPS : *Matrix Product State*. On se donne un état quantique pur à N qbit, que l'on désigne par son ket d'état $|\psi\rangle$. On commence par faire une décomposition de Schmidt en séparant le qbit de poids fort avec le reste (on suppose de manière implicite que chaque μ_j varie de 1 à χ_j) :

$$|\psi\rangle = \sum_{\mu_{N-1}} \lambda_{\mu_{N-1}} |\mu_{N-1}\rangle_{[N-1]} |\mu_{N-1}\rangle_{[N-2,\dots,0]}$$

Ensuite, on décompose le qbit de poids fort dans la base canonique :

$$|\mu_{N-1}\rangle_{[N-1]} = \sum_{i_{N-1}=0}^1 \langle i_{N-1} | \mu_{N-1} \rangle_{[N-1]} |i_{N-1}\rangle$$

En notant $A(N-1)_{\mu_{N-1}}^{i_{N-1}} = \lambda_{\mu_{N-1}} \langle i_{N-1} | \mu_{N-1} \rangle_{[N-1]}$,

$$|\psi\rangle = \sum_{i_{N-1}} \sum_{\mu_{N-1}} A(N-1)_{\mu_{N-1}}^{i_{N-1}} |i_{N-1}\rangle |\mu_{N-1}\rangle_{[N-2,\dots,0]}$$

Maintenant, on répète l'opération pour le qbit $N-2$, sauf que les coefficients de Schmidt (les λ) dépendent aussi de μ_{N-1} :

$$|\mu_{N-1}\rangle_{[N-2,\dots,0]} = \sum_{\mu_{N-2}} \lambda_{\mu_{N-1},\mu_{N-2}} |\mu_{N-2}\rangle_{[N-2]} |\mu_{N-2}\rangle_{[N-3,\dots,0]}$$

$$|\mu_{N-2}\rangle_{[N-2]} = \sum_{i_{N-2}=0}^1 \langle i_{N-2} | \mu_{N-2} \rangle_{[N-2]} |i_{N-2}\rangle$$

Donc en notant $A(N-2)_{\mu_{N-1},\mu_{N-2}}^{i_{N-2}} = \lambda_{\mu_{N-1},\mu_{N-2}} \langle i_{N-2} | \mu_{N-2} \rangle_{[N-2]}$,

$$|\psi\rangle = \sum_{\substack{i_{N-1} \\ i_{N-2}}} \sum_{\substack{\mu_{N-1} \\ \mu_{N-2}}} A(N-1)_{\mu_{N-1}}^{i_{N-1}} A(N-2)_{\mu_{N-1},\mu_{N-2}}^{i_{N-2}} |i_{N-1}\rangle |i_{N-2}\rangle |\mu_{N-2}\rangle_{[N-3,\dots,0]}$$



FIGURE 1 – Représentation diagrammatique d'un MPS

Si on continue à itérer le procédé, on se retrouve avec la forme MPS :

$$|\psi\rangle = \sum_{i_{N-1}, \dots, i_0} \sum_{\mu_{N-2}, \dots, \mu_0} A(N-1)_{\mu_{N-2}}^{i_{N-1}} A(N-2)_{\mu_{N-2}, \mu_{N-3}}^{i_{N-2}} \dots A(1)_{\mu_1, \mu_0}^{i_1} A(0)_{\mu_0}^{i_0} |i_{N-1} \dots i_0\rangle$$

Au centre, on a des tenseurs de rang 3, puis aux extrémités des tenseurs de rang 2 (matrices). Comme on peut le constater, effectuer des opérations analytiquement sur une telle forme n'a rien de pratique. C'est pourquoi on préfère utiliser des diagrammes tensoriels. Dans cette représentation, le nombre de "pattes" de chaque tenseur correspond à son rang.

2.2 Contraction tensorielle

Pour deux tenseurs A et B qui partagent un indice i prenant les mêmes valeurs, la contraction tensorielle est le tenseur indexé par tous les autres indices de A et B et où l'on a sommé sur i le produit de A et B . Par exemple, si on se donne $(A)_{\alpha, \beta, \gamma}$ et $(B)_{\delta, \alpha, \epsilon}$, où α varie entre 1 et p , la contraction tensorielle de A et B est le tenseur $(C)_{\beta, \gamma, \delta, \epsilon}$ tel que $\forall \beta, \gamma, \delta, \epsilon$:

$$C_{\beta, \gamma, \delta, \epsilon} = \sum_{\alpha=1}^p A_{\alpha, \beta, \gamma} B_{\delta, \alpha, \epsilon}$$

Sous forme diagrammatique, cette opération se représente simplement par une interconnexion des pattes de deux tenseurs, où la patte concernée correspond à l'indice de sommation. Le tenseur résultant a un rang égal au nombre de pattes sortantes de l'ensemble des deux tenseurs contractés. La figure 1 prend tout son sens : MPS n'est en fait rien d'autre qu'une contraction tensorielle de N tenseurs, et chaque tenseur (que l'on appelle *site*) correspond à un qbit.

2.3 Calcul rapide d'opérations quantiques

A ce stade-là, on peut se demander : quel peut bien être l'intérêt de la décomposition en MPS ? On obtient une subdivision compliquée avec plein d'indices, et on ne sait pas bien manipuler un tel état... Et bien les MPS permettent en fait de simuler très efficacement les portes quantiques unitaires à 1 et 2 qbits ! Malheureusement, cela a un prix : on perd en précision et le résultat obtenu n'est pas exact. Cependant, on peut quantifier cette erreur et ajuster les paramètres de notre MPS pour essayer de mimer les ordinateurs quantiques actuels (avec leurs défauts).

Dans la suite, on impose que $\forall j, \chi_j \leq \chi$ où χ est un paramètre qu'il faudra ajuster. Intuitivement, chaque χ_j correspond au degré d'intrication entre les qbits j et $j+1$, donc notre condition revient à limiter l'intrication du système. Pour quantifier cette intrication, on utilise la mesure $E_\chi = \log_2(\chi)$.

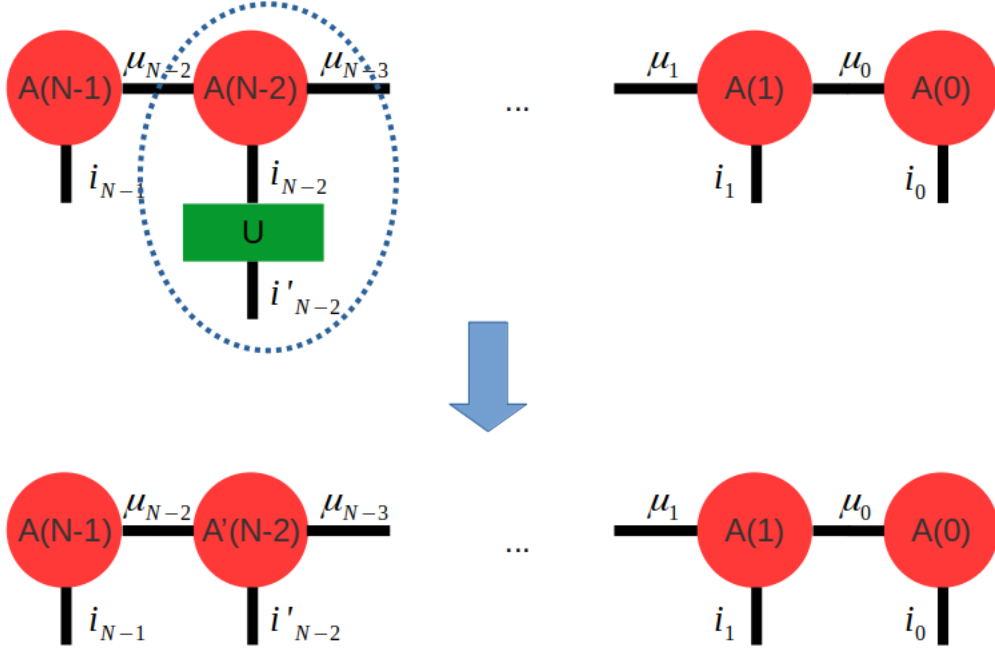


FIGURE 2 – Application d’une porte à 1 qbit sur un MPS

2.3.1 Effet d’une porte à 1 qbit

Si on considère l’unitaire U sur 1 qbit, pour obtenir le tenseur résultant il suffit de considérer la contraction tensorielle de l’unitaire et du tenseur concerné sur la branche i_k . La figure 2 illustre le processus. Ce qui est remarquable, c’est que l’on a seulement besoin de calculer les

$$A'(k)_{\mu_k, \mu_{k-1}}^{i'_k} = \sum_{i_k} U_{i'_k, i_k} A(k)_{\mu_k, \mu_{k-1}}^{i_k}$$

pour chaque μ_k et chaque μ_{k-1} , donc le coût total de l’opération est en $\mathcal{O}(\chi^2)$.

2.3.2 Effet d’une porte à 2 qbit

Pour compléter notre analyse, il faut s’attarder sur les portes à 2 qbits (les portes à 1 qbit et 2 qbit sont universelles). Ce cas est un peu plus compliqué. On considère l’unitaire U qui agit sur 2 qbits adjacents k et $k+1$. On réalise les opérations décrites ci-dessous. La figure 3 aide grandement à la compréhension.

1. On contracte $A(k)$ et $A(k+1)$ en un tenseur noté $(T_{\mu_{k+1}, \mu_{k-1}}^{i_{k+1}, i_k})$
2. On contracte U et T , en regardant U comme un tenseur de rang 4 :

$$(T')_{\mu_{k+1}, \mu_{k-1}}^{i'_{k+1}, i'_k} = \sum_{i_{k+1}, i_k} \tilde{U}_{i'_{k+1}, i'_k, i_{k+1}, i_k} T_{\mu_{k+1}, \mu_{k-1}}^{i_{k+1}, i_k}$$

avec

$$\tilde{U}_{a,b,c,d} = U_{2a+b, 2c+d}$$

3. On fait une SVD sur T' , en regardant T' comme une matrice \tilde{T}' de taille $2\chi \times 2\chi$:

$$\tilde{T}'_{i,j} = \sum_{\mu_k} \tilde{X}_{i, \mu_k} S_{\mu_k} \tilde{Y}_{\mu_k, j}$$

avec

$$(T')_{\mu_{k+1}, \mu_{k-1}}^{i'_{k+1}, i'_k} = \tilde{T}'_{i'_{k+1}\chi + \mu_{k+1}, i'_k\chi + \mu_{k-1}}$$

On peut alors considérer \tilde{X} et \tilde{Y} comme des tenseurs d’ordre 3, de sorte que :

$$(T')_{\mu_{k+1}, \mu_{k-1}}^{i'_{k+1}, i'_k} = \sum_{\mu_k} X_{\mu_{k+1}, \mu_k}^{i'_{k+1}} S_{\mu_k} Y_{\mu_k, \mu_{k-1}}^{i'_k}$$

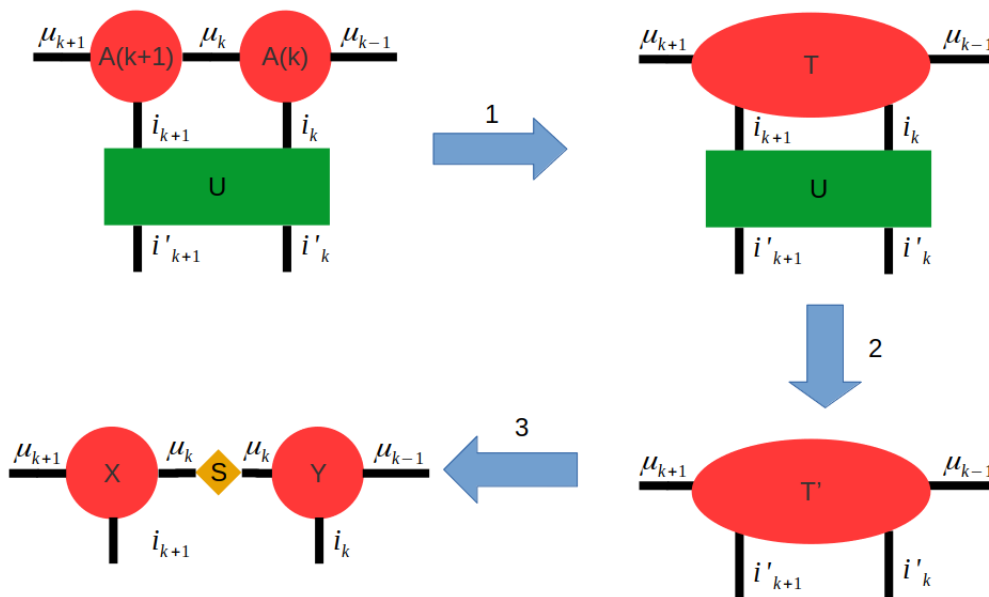


FIGURE 3 – Application d'une porte à 2 qbit sur un MPS

avec

$$X_{\mu_{k+1}, \mu_k}^{i'_{k+1}} = \tilde{X}_{i'_{k+1}\chi + \mu_{k+1}, \mu_k}$$

$$Y_{\mu_k, \mu_{k-1}}^{i'_k} = \tilde{Y}_{\mu_k, i'_k\chi + \mu_{k-1}}$$

On se retrouve avec une décomposition en 2 tenseurs séparés par une matrice, et avec μ_k qui varie au plus entre 1 et 2χ . Autrement dit, l'application de la porte unitaire U a pu augmenter le degré d'intrication entre les qbits k et $k+1$: c'est logique. C'est là où l'on fait intervenir une approximation : on ne conserve que les χ plus grandes valeurs singulières de S . De cette manière, on continue à imposer que le degré d'intrication doit être borné par χ .

4. On regroupe S avec un des deux tenseurs, par exemple X :

$$A'(k+1)_{\mu_{k+1}, \mu_k}^{i'_{k+1}} = X_{\mu_{k+1}, \mu_k}^{i'_{k+1}} S_{\mu_k}$$

$$A'(k)_{\mu_k, \mu_{k-1}}^{i'_k} = Y_{\mu_k, \mu_{k-1}}^{i'_k}$$

Au final, les étapes 1, 2 et 4 se font en $\mathcal{O}(\chi^2)$, mais l'étape la plus gourmande en calculs est l'étape 3, qui demande $\mathcal{O}(\chi^3)$ opérations à cause de la décomposition en valeurs singulières.