学校代码： 10246
学　　号： 16110190045

复旦大学

博 士 学 位 论 文

（学术学位）

Z_2 格点规范理论的量子模拟及其在图论量子算法中的应用

Quantum Simulation of Z_2 Lattice Gauge Theory and Its Application in Quantum Algorithm of Graph Theory

院　　系： 物理系
专　　业： 理论物理
姓　　名： 崔晓鹏
指 导 教 师： 施郁 教授

完 成 日 期： 2020 年 8 月 10 日

目 录

摘要

第一章阐述了课题的研究背景:Z_2 格点规范理论，以及本文的主要研究内容。Z_2 格点规范理论与粒子物理的规范场论，凝聚态物理的拓扑量子相变，量子信息的长程纠缠和拓扑量子计算，图论算法问题等诸多领域具有深刻联系，从而成为物理学多个热门领域的关注对象。对该理论的量子模拟研究有望推动诸多领域的进展。

第二章概述了一种基于通用量子线路实现的量子 Z_2 格点规范理论的量子模拟方案，并在 GPU 量子模拟器上利用数字化绝热量子演化算法对其所具有的量子拓扑相变进行了研究。这是目前第一次使用基于线路模型的量子模拟方法系统性地研究了 D=2+1 和 D=3+1 量子 Z_2 格点规范理论，提取了其拓扑量子相变的所有关键特征并进行了对比分析。蒙特卡罗模拟法是研究格点规范理论最重要的非微扰定量方法，它的成功却受到符号问题和随机数问题的困扰。然而革命性的计算技术: 通用量子计算解决了这些问题。在量子霸权到来之际，我们的演示方案有望在一台真实的通用量子计算机上编程实现。

第三章基于数字化绝热量子演化算法对量子 Z_2 格点规范理论的格子拓扑由 Torus 缓慢转变到 Klein 瓶的过程进行了研究。Torus 和 Klein 瓶是两种典型的拓扑曲面结构。它们具有不同的拓扑定向性。研究发现由于格子拓扑的变化引起了一种新颖的拓扑量子相变，并详细研究了该相变的临界行为以及相图。该部分内容推动了对格点规范理论的这一新型拓扑量子相变的研究并加深了对 Z_2 规范理论和空间拓扑结构关系的理解。

第四章基于 Z_2 拓扑量子相变的闭弦凝聚特性，通过将图映射为格子提出了一种具有时间复杂度 $O(\frac{1}{g_c^2}\sqrt{\frac{1}{\varepsilon}N_e^{3/2}(N_v^3+\frac{N_e}{g_c})})$ 的量子算法可获取图所对应格子的闭弦凝聚态，有助于解决该图的哈密顿回路问题 (HCP)。利用该算法模型，通过对大量小尺寸随机图的模拟我们发现图的哈密顿回路的数量对其所映射格子的 Z_2 拓扑量子相变临界参数 g_c 有显著影响。当 N_e, N_v 固定时,g_c 均值和 $\sqrt{N_{hc}}$ 呈线性关系。当 N_v 固定时,$\frac{1}{g_c}$ 均值和 N_e 呈线性关系。基于此，我们进一步讨论了量子计算机上利用 g_c 来推断哈密顿回路数目的算法的可能性。

第五章基于微软最新推出的 Q# 量子编程语言开发了一个开源的量子基本线性代数和量子模拟库 QBLAS。随着量子计算软硬件研究的快速推进，以量子线性代数为特征的各种量子算法雨后春笋般诞生，指数级地加速了各种计算任务以及机器学习任务。此外，作为量子计算的杀手级应用，量子模拟在解决蒙特卡洛符号问题，强关联求解问题，非平衡动力学模拟问题等方面有着得天独厚的优势。如此趋势下，有必要系统地开发一个以量子基本线性代数和量子模拟为主的算法库，以迎接量子时代的到来。QBLAS 就是一个这样的量子算法库。

第六章对全文工作做了总结，并对该领域未来的发展做了展望。本文通过对 Z_2 格点规范理论的量子模拟，研究了其拓扑量子相变的特征，在空间拓扑结构变化下的行为，以及和图论 HCP 问题的精彩互动。其结果将推动格点规范理论，拓扑学，图论和量子计算等的进一步融合发展。

关键词： Z_2 格点规范理论；量子模拟；拓扑量子相变；绝热量子算法；基态简并度；图论；量子算法；哈密顿回路问题；量子基本线性代数；QBLAS

中图分类号： **O413.4**

Abstract

The chapter 1 describes the research background:Z_2 lattice gauge theory and the main research content of this paper. The Z_2 lattice guage theory is deeply related to gauge field theory of particle physics, topological quantum phase transition of condensed matter physics, long-range entanglement and topological quantum computation of quantum information, algorithm problem of graph theory, etc. The quantum simulation research of this theory is expected to promote the development of many fields.

In chapter 2, we outline a quantum simulation scheme of quantum Z_2 gauge theory implemented with universal quantum circuit and use digitized adiabatic quantum simulation algorithm to study the Z_2 topological quantum phase transition. This is the first presentation up to our knowledge, to contrastively study the D=2+1 and D=3+1 quantum Z_2 gauge theory and extract all the key features of the topological quantum phase transitions using universal quantum computer approach. Monte Carlo simulation is the most important non-perturbative quantitive method in the study of the gauge theories, successful, however, suffer from the notorious sign problem and random number problem. the revolutionary computing technology: universal quantum computer shed a light on these problems. At the dawn of quantum supremacy, our demonstration can be realized on a real universal quantum computer in the near feature.

In chapter 3, the digitized adiabatic quantum simulation algorithm is used to study the quantum Z_2 lattice gauge theory in the process of slowly changing the lattice topology from torus to klein bottle. Torus and klein bottle are two typical topological surface structures. They have different topological orientations. The novel topological quantum phase transition(TQPT) caused by the change of lattice topology is found. Then the critical behavior and phase diagram of this phase transition are studied in detail. This part promotes the research of the new TQPT in the lattice guage theory and deepens the understanding of the relationship between Z_2 gauge theory and spatial topological structure.

In chpater 4, using the condensed close string characteristics of Z_2 topological quantum phase transition, by mapping a graph to a lattice we develop a quantum algorithm with time complexity $O(\frac{1}{g_c^2}\sqrt{\frac{1}{\varepsilon}N_e^{3/2}(N_v^3+\frac{N_e}{g_c})})$to obtain the closed string condensate of its corresponding lattice, which is helpful to solve the Hamilton cycle problem (HCP) of the graph. Using this algorithm model, by the simulation of a number of small random graphs we find that the number of Hamiltonian cycles in a graph has a significant effect on the critical parameter g_c of Z_2 topological quantum phase transition of its corresponding lattice, the average of g_c with $\sqrt{N_{hc}}(N_e, N_v$ is fixed) and the average of $\frac{1}{g_c}$ with $N_e(N_v$ is fixed) are all a linear relationship. Based on this, we further discuss the possibility of a algorithm which uses g_c to infer the number of Hamiltonian cycles in a graph on a quantum computer.

In chapter 5, an open source quantum basic linear algebra and quantum simulation library(QBLAS) is developed based on the newest Q# quantum programming language of Microsoft. With the rapid development of quantum computing software and hardware, various quantum algorithms characterized by quantum linear algebra spring up like mushrooms. These algorithms exponentially accelerate various computational and machine learning tasks. In addition, as the killer application of quantum computing, quantum simulation has unique advantages in solving monte carlo symbol problems, strong correlation problems and non-equilibrium dynamics simulation problems. With this trend, it is necessary to systematically develop an algorithm library focus on quantum basic linear algebra and quantum simulation algorithm for welcoming the arrival of the quantum era. QBLAS is such a quantum algorithm library.

The chapter 6 summarizes the work in this article and discusses the future development of the field. By adiabatic quantum simulation of Z_2 lattice gauge theory , this article studies the characteristics of its topological quantum phase transition , novelty behavior when the changes of spatial topology, as well as wonderful interaction with HCP problem of graph theory. These results will drive the further integration of lattice gauge theory, topology, graph theory and quantum computing.

Key Words: Z_2 lattice gauge theory; quantum simulation; topological quantum phase transition; adiabatic quantum algorithm; ground state degeneracy; graph theory; quantum algorithm; Hamiltonian cycle problem; quantum basic linear algebra; QBLAS

CLC Number: O413.4

第 1 章　绪论

1.1　Z_2 格点规范理论简介

规范理论最早由电磁场所对应的 U(1) 规范理论发展而来，后来发展为电弱，强相互作用统一的理论模型，而今已成为粒子物理标准模型的理论基础。格点规范理论是在 20 世纪 70 年代由粒子物理领域所引入[1,2]。其将规范理论置于离散为格点的时空中进行研究。时空的离散化解决了规范理论中积分发散等难题，同时也带来了多种新特性。而如今格点规范理论也成为了量子自旋液体研究的基础理论[3]，揭示了量子自旋液体长程纠缠，拓扑序[4]，弦网凝聚[4,5] 等多种新奇特性，从而受到凝聚态领域的高度重视。此外，量子计算领域近年来以 Kitaev 模型为基础提出了 Toric code 拓扑纠错码[6,7]，带动了拓扑量子计算的快速发展[8]。而该模型实质上可以等价为格点规范模型的一种变体。2019 年 Google 公司在研究该模型中首次实现了量子霸权[9]。如此以来，格点规范理论已经成为物理学多个热门领域的关注对象，对其特性的详细研究势必带动多个重要方向的进展。

Z_2 格点规范理论或简称 Z_2 规范理论，是 U(1) 格点规范理论的最简单情况，在凝聚态方向因为其和横场 Ising 模型有着多种对偶关系也被成为 Ising 规范理论[2,3,10]。此外，第一种精确可解的拓扑量子相变模型:Kitaev 模型通过幺正变换也可转换为 Z_2 规范理论的一种变体 Toric code 模型[6,7]，位于 Kagome 格子上的一种海森堡模型 QDM 也可以等价为某种 Z_2 规范理论[11,12]。

Z_2 规范理论最早由 Wegner 于 1971 年引入并发现了该理论存在着一个无局域对称性破缺的特殊量子相变[2]，后被称为拓扑量子相变。Wegner 定义 Z_2 规范理论在 D 维 (D=d+1，d 为空间维数，1 为时间维数) 时空方格子上的经典配分函数如下

$$Z_{Z_2} = \sum_{\sigma_{ij}=\pm 1} e^{-H_{Z_2}/T},\ H_{Z_2} = -K \sum_{\square} \prod_{ij\in\square} \sigma_{ij} \tag{1.1}$$

配分函数中的自由度为方格子的边（link）$l = ij$ 上的二进制变量 $\sigma_{ij} = \pm 1$，i, j 为格子中的临近格点。其中 $\square$ 表示方格子中的基本小方块 (plaquette)，如图1-1所示。