

На правах рукописи

Чернявский Андрей Юрьевич

**МИНИМУМ ЭНТРОПИИ ИЗМЕРЕНИЙ КАК
ВЫЧИСЛИМАЯ МЕРА ЗАПУТАННОСТИ
МНОГОЧАСТИЧНЫХ КВАНТОВЫХ
СОСТОЯНИЙ**

Специальность

05.27.01 – твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты,
микро- и нанoeлектроника, приборы на квантовых эффектах

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2010

Работа выполнена в *Учреждении Российской Академии Наук
Физико-технологическом институте РАН (ФТИАН)*.

Научный руководитель: *доктор физико-математических наук,
профессор
Ожигов Юрий Игоревич*

Официальные оппоненты: *доктор физико-математических наук,
профессор
Молотков Сергей Николаевич*

*доктор физико-математических наук,
профессор
Кулик Сергей Павлович*

Ведущая организация: *Казанский (Приволжский) федеральный
университет*

Защита состоится «23» декабря 2010 г. в 15 часов на заседании диссертационного совета Д 002.204.01 в Физико-технологическом институте РАН по адресу: 117218, Москва, Нахимовский проспект, д. 36, корп. 1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФТИАН.

Автореферат разослан «19» ноября 2010 г.

Отзывы и замечания по автореферату в двух экземплярах, заверенные печатью, просьба высылать по вышеуказанному адресу на имя ученого секретаря диссертационного совета.

Ученый секретарь диссертационного совета

кандидат физико-математических наук



В.В. Вьюрков

Общая характеристика работы

Работа посвящена построению, вычислению и изучению свойств мер квантовой запутанности чистых многочастичных и многофермионных состояний.

Актуальность работы

Эффект квантовой запутанности лежит в основе многих приложений квантовой теории.

Например, известно [1], что использование запутанных квантовых состояний является необходимым условием для работы одного из самых перспективных устройств на квантовых эффектах – квантового компьютера. А именно, квантовые вычисления, величина двухчастичной запутанности в которых (в смысле ранга Шмидта) полиномиально зависит от числа кубитов, могут быть эффективно смоделированы на классическом компьютере. Т.е. для экспоненциального ускорения квантового компьютера необходимо, как минимум, экспоненциальный рост двухчастичной квантовой запутанности. Также доказано [2], что ни одна нетривиальная задача не может быть решена алгоритмом Гровера (квантовым алгоритмом поиска) без использования запутанности. Следует отметить, что вопрос о связи многочастичной запутанности с быстрыми квантовыми вычислениями является открытым.

Кроме того, известные результаты о двухчастичной квантовой запутанности играют важнейшую роль в кодах коррекции квантовых ошибок, необходимых для построения полноценного квантового компьютера, что дает основания говорить о перспективности исследования многочастичной квантовой запутанности и для этого направления.

Важную роль запутанность играет и в квантовой криптографии. Во-первых, существуют экспериментально реализованные протоколы квантовой криптографии, использующие квантовые запутанные состояния, и, во-вторых, наиболее эффективные (из известных на данный момент) атаки на квантовые криптографические протоколы включают в себя запутывание передаваемых квантовых состояний с анциллами (вспомогательными состояниями) подслушателя. Также использование запутанных состояний лежит в основе таких приложений, как квантовая телепортация и квантовое плотное кодирование.

Развитие теоретических аспектов квантовых запутанных состояний, помимо приведенных выше приложений, дает лучшее понимание основных законов квантовой физики [3] и методов моделирования сложных квантовых систем [4].

Впервые понятие запутанности было определено Э. Шредингером еще в 1935 году [5]: «Максимальное знание о всей <запутанной> системе не обязательно влечет за собой знание о всех ее подсистемах, даже тогда, когда подсистемы полностью отделены друг от друга, и в данный момент никак

не взаимодействуют.» Однако, несмотря на достаточно большую историю вопроса, окончательной теории квантовых запутанных состояний до сих пор не существует. Одним из актуальных открытых вопросов данной теории является численная оценка степени запутанности. Этот вопрос особенно важен в связи с идеей, неоднократно высказываемой академиком К.А. Валиевым и многими другими учеными: квантовая запутанность является *физическим ресурсом*, имеющим важное значение для различных приложений, а особенно для квантового компьютера. В связи с этим появляется необходимость в количественной оценке такого ресурса. Такой оценке и посвящена диссертационная работа, основной задачей которой являлось построение точного численного критерия величины (меры) запутанности систем многих квантовых частиц, с учетом их возможной тождественности и фермионной природы.

Полностью изученной в теории квантовой запутанности является область чистых двухчастичных состояний: запутанность таких состояний целиком определяется коэффициентами разложения Шмидта, а мерой является энтропия этих коэффициентов – редуцированная энтропия фон Неймана. Для случая трех кубитов данное разложение уже не существует. Следует отметить, что вопрос о расширении разложения Шмидта на число кубитов больше двух актуален и в области математики: в терминах алгебры разложение Шмидта называется сингулярным матричным разложением, а задача его хорошего расширения на тензоры высших размерностей является открытой и важной. Представляемая в работе мера E_{Hmin} , основанная на минимизации энтропии измерений, является продолжением разложения Шмидта: вычисление меры для двухчастичных состояний приводит к разложению Шмидта, а само значение меры на этих состояниях совпадает с редуцированной энтропией фон Неймана.

За последнее время вопрос мер квантовой запутанности выделился в отдельную быстро прогрессирующую теорию. Ключевым моментом развития этой теории является впервые сформулированный Ведралом и Пленнио [6] набор обязательных и желательных требований, налагаемых на меры. Однако, хотя бы частичное совмещение необходимых и желательных свойств в одной мере является нетривиальной и важной задачей. Например, мера Шмидта [7], хотя и обладает необходимыми свойствами и свойством аддитивности, принимает лишь дискретное число значений и не имеет универсального способа вычисления (для меры E_{Hmin} , построенной в диссертационной работе, разработан и реализован универсальный метод вычисления). Хорошо известная мера 3-tangle определена только для трехкубитных состояний, а ее обобщение n-tangle [8] определено только для 3 и четного числа кубитов. К тому же эти меры равны нулю на состояниях Вернера (W-состояниях), которые в некотором смысле максимально запутаны. Мера E_{Hmin} определена для произвольного числа частиц и их размерностей, а также равна нулю только на

полностью незапутанных состояниях. Подход, основанный на нильпотентных полиномах [9], позволяет построить аддитивный полином (tanglermeter), однозначно определяющий орбиту многочастичной запутанности. Однако, при помощи такого подхода не построены меры, удовлетворяющей необходимым и желательным требованиям. Мера E_{Hmin} обладает всеми необходимыми свойствами для фиксированных размерностей частиц, в том числе и монотонностью (невозрастанием относительно локальных операций), а также аддитивна относительно добавления частиц.

В связи с тем, что все реальные квантовые частицы обладают свойством тождественности, актуальным является вопрос о квантовой запутанности в терминах идентичных частиц. Данный случай изучен много хуже, нежели случай различимых частиц; в том числе практически не представлены никакие меры такой запутанности. Для случая двух фермионов существует аналог разложения Шмидта – разложение Слэйтера [10]. Мера E_{Hmin} распространена на случай многих фермионов. Она равна нулю на состояниях, представляемых детерминантом Слэйтера и только на них, и, как показывают численные эксперименты, для двух фермионов E_{Hmin} совпадает с энтропией разложения Слэйтера. Рассматриваемый подход позволяет построить и меру многобозонной запутанности, однако, в отсутствие какой-либо теории таких мер не представляется возможным проверить ее адекватность.

Целью диссертационной работы являлось:

- построение меры квантовой запутанности чистых многокудитных* состояний и исследование свойств этой меры;
- построение меры квантовой запутанности чистых многофермионных состояний и исследование свойств этой меры;
- разработка метода вычисления построенных мер запутанности;
- вычисление значения предложенных мер запутанности для некоторых важных многочастичных квантовых состояний;
- исследование задачи о существенности многочастичной запутанности (невозможности описания многочастичной запутанности при помощи двухчастичной) и анализ предложенной меры на предмет существенной многочастичности.

* кудит – d-уровневая квантовая система

Научная новизна работы заключается в следующих положениях:

1. Построена мера запутанности чистых многокудитных квантовых состояний, основанная на минимизации энтропии измерений.

Аналитически доказаны следующие ее свойства:

- инвариантна относительно локальных унитарных преобразований;
- равна нулю на полностью незапутанных состояниях и только на них;
- не возрастает в среднем относительно локальных ортогональных измерений;
- аддитивна в смысле добавления кудитов;
- на двухчастичных состояниях совпадает с энтропией фон Неймана.

Численные эксперименты показали, что данная мера обладает следующими свойствами:

- квадраты модулей амплитуд состояния, имеющего минимум энтропии измерений, являются инвариантами локальной унитарной орбиты этого состояния;
- инвариантна относительно добавления к состоянию незапутанной анциллы;
- аддитивна в смысле расширения пространства и, следовательно, в связи с монотонностью относительно ортогональных измерений, монотонна относительно протокола ЛОСС (локальные операции и классические коммуникации);
- не может быть выражена через коэффициенты Шмидта для числа кудитов больше 2 (является существенно многочастичной).

2. Построена мера запутанности чистых многофермионных квантовых состояний, основанная на минимизации энтропии измерений. Доказано, что данная мера равна нулю на состояниях, являющихся детерминантом Слэйтера в каком-либо одночастичном базисе, и только на них. Численно установлено, что для двухфермионных состояний данная мера совпадает с энтропией разложения Слэйтера.

3. Разработан метод вычисления предложенных мер запутанности.

4. Создан программный комплекс для вычисления значений предложенных мер запутанности, а также решения других оптимизационных задач, связанных с чистыми многочастичными состояниями. Вычисление многокубитной запутанности реализовано с использованием технологии вычислений на графических процессорах nVidia CUDA.

5. При помощи реализованного программного комплекса построен контр-пример, показывающий невозможность описания многочастичной запутанности при помощи двухчастичной (решена задача о существенной многочастичности).
6. Были вычислены и проанализированы значения меры E_{Hmin} и ее флуктуации для некоторых важных для квантовой теории многочастичных состояний, а именно: для обобщенных GHZ-состояний; для обобщенных W-состояний; для состояний квантового алгоритма Гровера (получена зависимость запутанности от числа кубитов); состояний со случайными амплитудами (получена зависимость среднего значения запутанности от числа кубитов и их размерности).

Теоретическая и практическая значимость

- Построенная мера запутанности, а также численное решение задачи о неэквивалентности двухчастичной и многочастичной запутанности являются теоретическими результатами.
- Вычисление значений предложенных мер запутанности, реализованное в программном комплексе, может быть использовано для оценки успешности экспериментов по генерации запутанных многочастичных квантовых состояний, особенно важных на пути создания квантового компьютера.
- Созданный программный комплекс может быть использован для решения различных оптимизационных задач в области теории квантовой запутанности чистых состояний.

Апробация работы

Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях и семинарах:

Семинар «Квантовая информатика» на факультете ВМК МГУ; семинар лаборатории квантовой информатики и квантовой оптики кафедры квантовой электроники физического факультета МГУ; семинар «Квантовые компьютеры» в Физико-Технологическом институте РАН; международный симпозиум «Quantum Informatics – 2009», Zvenigorod, Russia; международная конференция «Mathematical Modeling and Computational Physics 2009», Dubna, Russia; научно-практическая конференция «Вычисления с использованием графических процессоров в молекулярной биологии и биоинформатике», 2010,

Москва, Биологический факультет МГУ; научная конференция «Ломоносовские чтения», 2010, Москва, МГУ.

Публикации

Материалы диссертации опубликованы в 8 печатных работах, из них 4 статьи в рецензируемых журналах [A1, A2, A3, A4], 1 статья в сборнике трудов конференции [A5] и 3 доклада конференций, опубликованных в тезисах [A6, A7, A8].

Личный вклад автора

Все результаты диссертации, включая предложенную меру запутанности многокудитных состояний, получены автором самостоятельно, и полностью опубликованы в журналах. Построение алгоритмов, создание программного комплекса и все численные расчеты проведены автором также полностью самостоятельно. Автор благодарит научного руководителя за постановку задачи и обсуждение работы на разных стадиях.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации 130 страниц. Работа содержит 16 рисунков и 5 таблиц. Библиография включает 130 наименований.

Содержание работы

Первая глава посвящена описанию формализма и известных фактов о мерах квантовой запутанности, а также определению и свойствам многокудитной и многофермионной меры запутанности, основанной на минимизации энтропии измерений.

В начале главы описываются необходимые и желательные свойства мер квантовой запутанности чистых многокудитных состояний.

Рассмотрим чистое многокудитное состояние

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n} a_{i_1 i_2 \dots i_n} |i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes \dots \otimes |i_n\rangle. \quad (1)$$

Тогда мера запутанности – это функция, определенная на всем множестве состояний и принимающая неотрицательные вещественные значения. Чтобы являться «правильной» мерой квантовой запутанности, такая функция должна удовлетворять некоторым свойствам:

- 1.1) Мера должна равняться нулю для полностью незапутанных состояний: $E(|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_n\rangle) = 0$.
- 1.2) Мера E должна быть инвариантна относительно локальных унитарных преобразований: $E(|\psi\rangle) = E(U_1 \otimes U_2 \otimes \dots \otimes U_n |\psi\rangle)$.
- 1.3) Мера должна быть монотонна (не возрастать) относительно локальных ортогональных измерений.

Отдельно можно выделить свойства, связанные с расширением пространства состояний:

- 2.1) Добавление к состоянию незапутанной анциллы не должно менять запутанность.
- 2.2) Мера должна быть монотонна (не возрастать) относительно протокола LOCC (локальные операции и классические коммуникации).

В свойстве 2.1 добавление анциллы подразумевает расширение пространства одного из кудитов: анцилла добавляется к какому-либо кудиту. Таким образом, число кудитов остается тем же, однако, если выбранный кудит рассматривался в пространстве H_d , то после добавления анциллы его пространство становится $H_d \otimes H_a$, где H_a – пространство состояний анциллы.

Также важным считается свойство аддитивности $E(|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle) = E(|\psi\rangle) + E(|\varphi\rangle)$, которое может быть сформулировано в двух вариантах:

1. Аддитивность в смысле добавления кудитов.

Состояния $|\psi\rangle$ и $|\varphi\rangle$ находятся в пространствах $H_1 \otimes \dots \otimes H_n$ и $H_{n+1} \otimes \dots \otimes H_{n+k}$, соответственно. Тогда состояние $|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle$ рассматривается в пространстве $H_1 \otimes \dots \otimes H_n \otimes H_{n+1} \otimes \dots \otimes H_{n+k}$ и его запутанность рассматривается между подсистемами $H_1, \dots, H_n, H_{n+1}, \dots, H_{n+k}$. Т.е. складывается число кудитов.

2. Аддитивность в смысле расширения пространства.

Состояния $|\psi\rangle$ и $|\varphi\rangle$ находятся в пространствах $H_1 \otimes \dots \otimes H_n$ и $H'_1 \otimes \dots \otimes H'_n$. Тогда состояние $|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle$ рассматривается в пространстве $(H_1 \otimes H'_1) \otimes (H_2 \otimes H'_2) \otimes \dots \otimes (H_n \otimes H'_n)$, а запутанность рассматривается между подсистемами $H_1 \otimes H'_1, H_2 \otimes H'_2, \dots, H_n \otimes H'_n$. В данном случае перемножаются размерности соответствующих кудитов, происходит расширение пространства состояний кудитов.

Во втором параграфе первой главы рассказывается о запутанности чистых двухчастичных состояний: описываются разложение Шмидта и его связь

с сингулярным разложением матриц (SVD-разложением), редуцированная энтропия фон Неймана, а также фундаментальные результаты Нильсена, связывающие коэффициенты Шмидта двухчастичного состояния с его преобразованиями при помощи протокола LOCC. Заканчивает параграф обоснование сложности перехода к многочастичному случаю.

В третьем параграфе приводятся некоторые известные меры, определенные для чистых многочастичных состояний, и их особенности, а также рассказывается о классификации трехкубитных состояний относительно SLOCC (стохастический протокол LOCC).

Четвертый параграф полностью посвящен новой мере запутанности E_{Hmin} для многокубитных состояний, основанной на минимизации энтропии измерений.

В первом пункте параграфа изложены краткие сведения об информационной энтропии Шеннона, играющей важную роль в определении E_{Hmin} , а также приводятся свойства энтропии Шеннона, используемые в дальнейших доказательствах. Далее в работе дается определение меры.

Рассмотрим процесс измерения состояния (1) в вычислительном базисе. Этот процесс можно рассматривать как источник сигнала с вероятностями $|a_{i_1, i_2, \dots, i_n}|^2$ и базисными состояниями $|i_1 i_2 \dots i_n\rangle$ в качестве выходов источника. Такой источник имеет фундаментальную характеристику – энтропию Шеннона:

$$H_{meas}(|\psi\rangle) = H_{sh}(Diag(|\psi\rangle\langle\psi|)) = - \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n=1}^d |a_{i_1, i_2, \dots, i_n}|^2 \ln |a_{i_1, i_2, \dots, i_n}|^2.$$

Назовем эту величину энтропией измерений состояний. Энтропию измерений, очевидно, нельзя использовать в качестве меры запутанности, т.к. она не является инвариантной относительно локальных унитарных преобразований, в связи с чем вводится следующий естественный инвариант:

$$E_{Hmin}(|\psi\rangle) = \min_{U_1, U_2, \dots, U_n} H_{meas}(U_1 \otimes U_2 \otimes \dots \otimes U_n |\psi\rangle), \quad (2)$$

где минимизация ведется по всем локальным унитарным преобразованиям (т.е. по всем локальным изменениям базиса).

Данный инвариант и будет являться мерой запутанности чистых многокубитных состояний.

Важно отметить, что в отличие от многих других мер, мера E_{Hmin} определена для любого количества и размерности кубитов.

Следующий пункт параграфа посвящен первым двум необходимым свойствам меры запутанности.

Свойство 1.1 (инвариантность относительно локальных унитарных преобразований) следует из определения меры E_{Hmin} .

Свойство 2.2 сформулировано в усиленном виде: пусть $|\psi\rangle$ – чистое состояние n кубитов (1), тогда

$$E_{Hmin}(|\psi\rangle) = 0 \Leftrightarrow |\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_n\rangle.$$

Таким образом равенство нулю E_{Hmin} является критерием запутанности.

В четвертом пункте доказывается необходимое свойство 1.3 (невозрастание в среднем относительно локальных ортогональных измерений), сформулированное в виде теоремы:

Теорема. Пусть $|\psi\rangle$ – чистое n -кубитное состояние. Состояния $|\psi_j\rangle$ – возможные результаты произвольного локального ортогонального измерения с соответствующими вероятностями p_j . Тогда

$$E_{Hmin}(|\psi\rangle) \geq \sum_j p_j E_{Hmin}(|\psi_j\rangle).$$

Далее доказываются два дополнительных свойства меры E_{Hmin} :

- 1) Аддитивность в смысле добавления кубитов.
- 2) Равенство меры E_{Hmin} редуцированной энтропии фон Неймана на двухчастичных состояниях.

Также аналитически вычисляется значение E_{Hmin} для обобщенных GHZ-состояний ($|GHZ\rangle = \sum_{i=1}^d a_i |i\rangle_1 \otimes |i\rangle_2 \otimes \dots \otimes |i\rangle_n$):

$$E_{Hmin}(|GHZ\rangle) = H_{meas}(|GHZ\rangle) = - \sum_{i=1}^d |a_i|^2 \ln |a_i|^2.$$

Следующие свойства меры E_{Hmin} были получены в результате численных экспериментов и пока требуют аналитического подтверждения:

1) Пусть состояния $|\psi\rangle$ и $|\varphi\rangle$ лежат на одной локальной унитарной орбите (т.е. $\exists U_1, U_2, \dots, U_n : U_1 \otimes U_2 \otimes \dots \otimes U_n |\psi\rangle = |\varphi\rangle$). Пусть также они имеют минимальное значение энтропии измерений H_{meas} на этой орбите. Тогда квадраты модулей их амплитуд совпадают. Т.е. квадраты модулей амплитуд аргумента минимума энтропии измерений являются инвариантами локальной унитарной орбиты.

2) E_{Hmin} аддитивна в смысле расширения пространства. Из этого следует инвариантность относительно добавления анциллы (свойство 2.1). Из свойства 2.1 и свойства 1.3 (монотонности относительно локальных ортогональных измерений) следует и монотонность относительно LOCC (свойство 2.2).

Последний параграф первой главы посвящен мере запутанности многофермионных состояний, основанной на минимизации энтропии измерений.

Рассмотрим чистое состояние n идентичных фермионов, где пространство одночастичных состояний каждого из них имеет размерность p и базис f_1, f_2, \dots, f_n :

$$|f\rangle = \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_n \leq p} \lambda_{i_1 i_2 \dots i_n} |i_1 i_2 \dots i_n\rangle, \quad (3)$$

где

$$\sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_n \leq p} |\lambda_{i_1 i_2 \dots i_n}|^2 = 1,$$

$$|i_1 i_2 \dots i_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} f_{i_1}(r_1) & \dots & f_{i_1}(r_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_{i_n}(r_1) & \dots & f_{i_n}(r_n) \end{vmatrix}$$

– детерминанты Слэйтера. Раскрытие детерминантов Слэйтера дает общий вид антисимметричного состояния в терминах кудитов.

Известными фундаментальными фактами в теории фермионной запутанности являются:

1) Критерий незапутанности (известный в алгебре как соотношения Плюккера).

2) Аналог разложения Шмидта для двух фермионов – разложение Слэйтера: любое двухфермионное состояние может быть представлено в виде

$$|f\rangle = \sum_{i=1}^{[k/2]} z_i |2k-1, 2k\rangle, \text{ где } |i, j\rangle \text{ – детерминанты Слэйтера.}$$

Определение меры E_{Hmin} для фермионов вводится аналогично с многокудитным случаем:

$$E_{Hmin}(|f\rangle) = \min_U H_{meas}(U \circ |f\rangle),$$

где $|f'\rangle = U \circ |f\rangle$ – состояние после перехода к другому одночастичному базису с унитарной матрицей перехода U . Коэффициенты состояния $|f'\rangle$ будут иметь вид:

$$\lambda'_{j_1 j_2 \dots j_n} = \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_n \leq p} \lambda_{j_1 j_2 \dots j_n} M_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{j_1, j_2, \dots, j_n},$$

где $M_{i_1, i_2, \dots, i_n}^{j_1, j_2, \dots, j_n}$ – детерминант матрицы, образованной пересечением j_1, j_2, \dots, j_n столбцов и i_1, i_2, \dots, i_n строк матрицы перехода U .

Из определения видно, что введенная мера запутанности многофермионных состояний инвариантна относительно преобразования базиса, а также равна нулю на состояниях, являющихся детерминантами Слэйтера в каком-либо одночастичном базисе и только на них.

Другое важное свойство многофермионной меры, аналогичное многокудитному случаю, было получено численно: на двухфермионных состояниях данная мера равна энтропии измерений разложения Слэйтера.

Вторая глава посвящена методам вычисления представленных в работе мер запутанности.

В первом параграфе главы дается постановка задачи вычисления E_{Hmin} . Из определений представленных мер видно, что задача их вычисления является задачей глобальной оптимизации, параметрами которой являются одна или несколько унитарных матриц. В связи с этим, первым шагом на пути решения должна быть параметризация унитарных матриц.

Для случая многих кубитов, такая параметризация хорошо известна:

$$U(\beta, \delta, \gamma) = \begin{pmatrix} e^{i(-\beta-\delta)} \cos \gamma & -e^{i(-\beta+\delta)} \sin \gamma \\ e^{i(\beta-\delta)} \sin \gamma & e^{i(\beta+\delta)} \cos \gamma \end{pmatrix}, \quad (4)$$

где β, δ, γ – действительные числа. Для покрытия множества всех унитарных матриц необходим еще и общий фазовый множитель (четвертый параметр), однако он не влияет на квантовые состояния. Кроме того, несложно заметить, что параметр β не влияет на энтропию измерений (т.к. в ее определении участвуют только квадраты модулей амплитуд состояния). Таким образом задача вычисления E_{Hmin} для n -кубитного состояния представляет собой задачу глобальной минимизации функции $2n$ переменных.

Задача хорошей параметризации унитарных матриц размерностей больше 2 является открытой. В данной работе были реализованы и протестированы четыре варианта такой параметризации: параметризация при помощи обобщенных углов Эйлера, параметризация при помощи SVD-разложения, параметризация экспонентой эрмитовой матрицы и параметризация при помощи ортогонализации Грамма-Шмидта. Оптимальной для работы оказалась параметризация экспонентой эрмитовой матрицы, она и была использована в большинстве дальнейших вычислений. Опишем данную параметризацию для унитарных матриц размера $d \times d$:

Сформируем эрмитову матрицу $H = \{h_{ij}\}$ размера $d \times d$: она задается комплексными элементами над диагональю и вещественными элементами на диагонали (всего d^2 вещественных параметров). В качестве унитарной матрицы мы берем $U = e^{iH}$. Таким образом задача вычисления n -кудитного состояния сводится к минимизации функции $d^2 \cdot n$ вещественных переменных. А вычисление запутанности n -фермионного состояния с p -мерным одночастичным пространством к минимизации функции p^2 вещественных переменных.

В следующем параграфе рассматриваются методы глобальной оптимизации и их применение для вычисления E_{Hmin} .

Как известно, не существует универсального метода решения задач глобальной оптимизации. Однако, современные вычислительные ресурсы позволяют эффективно использовать для таких задач некоторые методы, требующие множественные вычисления значений оптимизируемой функции.

Для вычислений мер E_{Hmin} были реализованы следующие три метода глобальной оптимизации: генетические алгоритмы, роевая оптимизация и метод случайных мутаций.

Генетические алгоритмы основаны на эвристике естественного отбора. Набор параметров задачи представляется хромосомой, а сами параметры обычно являются отдельными генами. Итерационно производится процесс эволюции, на каждом шаге которого отбираются наиболее приспособленные особи, среди них производится скрещивание, а над потомками производятся случайные мутации.

Роевой метод, являющийся достаточно новым подходом к оптимизации, был предложен Кеннеди и Эберхартом в 1995 году [11]. Данный метод основан на моделировании поведения роя. Каждый экземпляр роя – точка в многомерном пространстве, соответствующая фиксированному набору параметров оптимизируемой функции. В простейшем случае движения экземпляра роя определяется несколькими факторами: инертностью – стремлением сохранить предыдущее направление скорости, обучаемостью – стремлением к своему лучшему за время положению и социальностью – стремлением к лучшему положению во всем рое.

Метод случайных мутаций является специальным упрощенным видом генетических алгоритмов. Как в этом методе, так и в генетических алгоритмах в работе был использован нестандартный вид мутаций:

Выбирается случайное целое число $n_{mut} \in [0, n_{maxmut}]$, где n_{maxmut} – параметр алгоритма. После этого выбираются случайным образом n_{mut} генов хромосомы и над ними производится следующая операция: $g = g + (10)^{order} \cdot shift$, где $order$ – целочисленная случайная величина, равномерно распределенная на $[order_{min}, order_{max}]$, $shift$ – вещественная случайная величина, равномерно распределенная на $[-1, 1]$. Для каждого изменяемого гена эти случайные величины независимы. Параметры $order_{min}$ и $order_{max}$ выбираются в зависимости от задачи. Такой вид мутаций позволяет силе мутации адаптироваться к текущей точности работы алгоритма в зависимости от итерации.

В работе описывается тестирование данных алгоритмов, как на стандартных тестовых функциях (для проверки реализации алгоритмов), так и на задачах вычисления E_{Hmin} . На тех задачах, на которых был возможен полноценный анализ качества сходимости (что требует большого числа расчетов), наилучшим оказался метод случайных мутаций.

Следующий параграф посвящен созданному в ходе работы программному комплексу.

Для решения задачи вычисления E_{Hmin} и решения других задач оптимизации, связанных с чистыми квантовыми состояниями, был создан программный комплекс. Комплекс состоит из следующих основных библиотек: библиотека работы с матрицами и параметризации унитарных матриц, библиотека работы с квантовыми состояниями, библиотека алгоритмов оптимизации, библиотека решения задач оптимизации для квантовых состояний. Опишем основные задачи, которые можно решать при помощи последней библиотеки:

1. задача минимизации произвольной функции на множестве многокудитных состояний (с фиксированным числом кудитов и заданными размерностями каждого кудита);
2. задача минимизации произвольной функции на локальной унитарной орбите фиксированного состояния;
3. задача минимизации произвольной функции на множестве многофермионных состояний (с фиксированным числом частиц и фиксированной размерностью одночастичного пространства);
4. задача минимизации произвольной функции по всевозможным изменениям одночастичного базиса фиксированного многофермионного состояния.

Задачи вычисления меры E_{Hmin} для многокудитных и многофермионных состояний относятся ко второму и четвертому пункту соответственно.

В параграфе описаны библиотеки комплекса и их функциональность, а в конце разбираются приемы, использованные для оптимизации времени вычислений.

В заключительном параграфе главы описывается реализация вычисления E_{Hmin} для многокубитных состояний с использованием технологии nVidia CUDA. Научные вычисления на графических адаптерах являются актуальной и очень быстро развивающейся темой. Современные графические адаптеры при невысокой цене имеют много большую производительность, нежели центральные процессоры, что к настоящему времени активно используется в различных областях науки, в том числе и в квантовой физике и информатике.

Алгоритм вычисления меры E_{Hmin} реализован в программном комплексе с использованием технологии вычислений на графических процессорах nVidia CUDA. В результате данной реализации было получено 14-кратное ускорение на графическом адаптере nVidia Geforce GTX 275 относительно четырехядерного процессора Intel Core2Quad Q6600. Данная реализация позволяет вычислять значение E_{Hmin} для состояний до 17 кубитов включительно.

В третьей главе приводятся результаты вычислений меры запутанности E_{Hmin} для различных состояний.

Первый параграф посвящен обобщенным W -состояниям:

$$|W\rangle = a_1|0\dots 01\rangle + a_2|0\dots 10\rangle + \dots + a_n|1\dots 00\rangle.$$

Вычисления показали, что такие состояния несут минимум энтропии измерений на локальной унитарной орбите, т.е. $E_{Hmin}(|W\rangle) = H_{meas}(W) = \sum_1^n |a_i|^2 \ln |a_i|^2$.

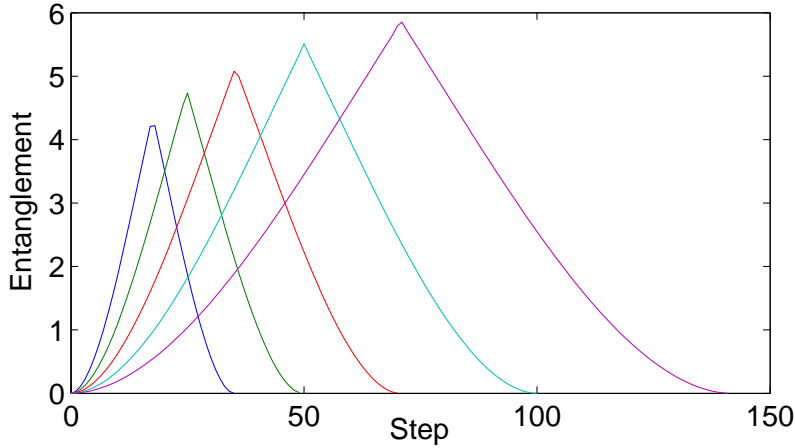


Рис. 1. Динамика запутанности алгоритмов Гровера с числом кубитов $n = 11, 12, 13, 14, 15$. По оси абсцисс – шаг алгоритма, по оси ординат – значение E_{Hmin} . Более «широкие» графики соответствуют большему n .

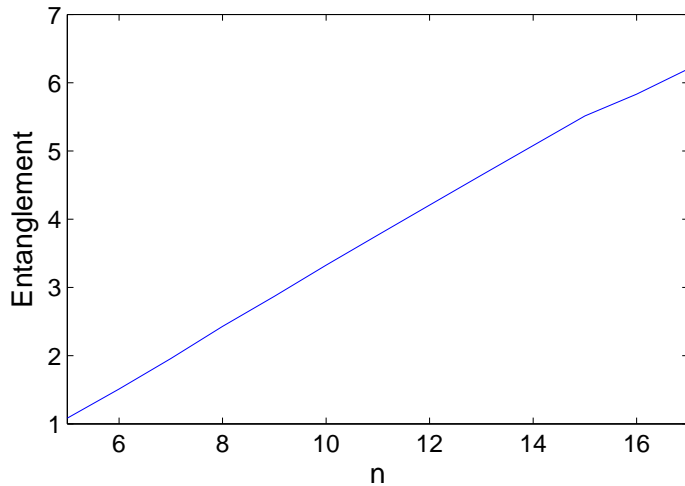


Рис. 2. Зависимость максимального значения меры запутанности E_{Hmin} в алгоритме Гровера от числа кубитов.

Во втором параграфе рассматривается динамика многочастичной запутанности в квантовом алгоритме Гровера. В работе приведены графики зависимости значения меры E_{Hmin} от шага алгоритма для числа кубитов от 6

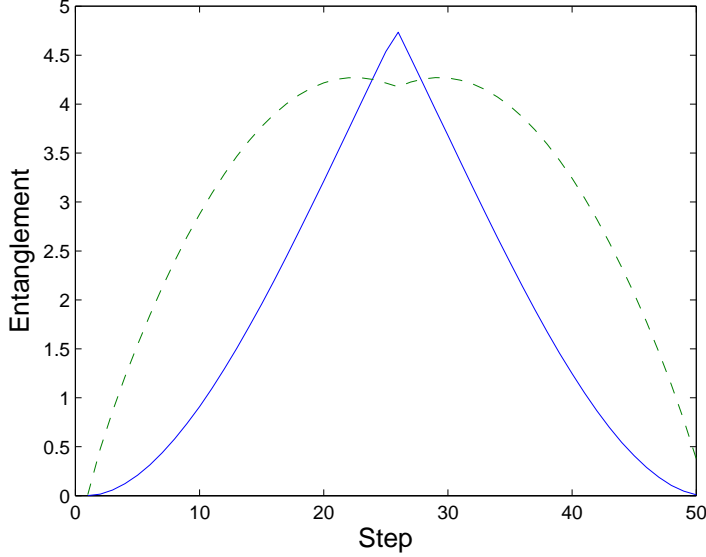


Рис. 3. Динамика меры E_{Hmin} (сплошная линия) и ее флуктуации (разрывная линия) в 12-кубитном алгоритме Гровера

до 15 включительно (на Рис. 1 автореферата приведены графики такой зависимости для случая от 11 до 15 кубитов). Проанализирована зависимость максимального значения запутанности от числа кубитов (рассмотрены случаи от 6 до 17 кубитов включительно). График этой зависимости приведен на Рис. 2. Как видно из графика, при $5 \leq n \leq 15$ зависимость максимального значения E_{Hmin} от числа кубитов близка к линейной. При $n = 16, 17$ заметно отклонение от линейной функции в сторону уменьшения. К сожалению, вычисления для большего числа кубитов из-за невозможности полноценного использования графических адаптеров является очень медленными, в связи с этим задача аналитического вычисления зависимости запутанности в алгоритме Гровера от числа кубитов является приоритетной, но пока не решена.

Третий параграф посвящен флуктуации меры E_{Hmin} . Флуктуация двухчастичной запутанности была определена в работе [12]. По аналогии с ней вводится и флуктуация меры E_{Hmin} :

$$\Delta E_{Hmin}(|\psi\rangle) = \sqrt{\sum \lambda_i \ln^2 \lambda_i - (\sum \lambda_i \ln \lambda_i)^2},$$

где λ_i – коэффициенты состояния, имеющего минимум энтропии измерений на локальной унитарной орбите состояния $|\psi\rangle$ (как показывают численные результаты первой главы, эти коэффициенты являются инвариантами орбиты).

В работе приводятся значения флуктуации меры E_{Hmin} обобщенных GHZ и W состояний, а также графики зависимости значения меры E_{Hmin} и ее флуктуации от коэффициента a_0 обобщенного GHZ-состояния и от коэффициентов a_0 и a_1 обобщенного W состояния трех кубитов. Также приводятся

и анализируются графики динамики флуктуации меры E_{Hmin} в алгоритме Гровера с различным числом кубитов. Характер динамики запутанности и ее флуктуации в алгоритме Гровера для различного числа кубитов сохраняется. Следует отметить, что в точках максимальной запутанности, в отличие от других шагов алгоритма, значение флуктуации сильно зависит от параметров алгоритмов оптимизации, т.е. является неустойчивой. На Рис. 3 автореферата в качестве примера приводится график динамики меры E_{Hmin} и ее флуктуации для 12-кубитного алгоритма Гровера.

Четвертый параграф посвящен динамике двухчастичной запутанности (редуцированной энтропии фон Неймана) многокубитных состояний под действием случайных преобразований. В работе приводятся и анализируются графики такой динамики для различных размерностей кубитов и числа кубитов, задействованных в преобразованиях. Основными результатами параграфа являются следующие факты: динамика запутанности под действием случайных преобразований имеет общий характер для различных параметров; среднеквадратичное отклонение такой динамики достаточно мало и заметно убывает при увеличении числа кубитов, задействованных в преобразованиях.

Пятый параграф посвящен значению меры E_{Hmin} и ее флуктуации для многокубитных состояний со случайными амплитудами. В данной части исследовалась как флуктуация запутанности, описанная выше, так и отклонение от среднего значения E_{Hmin} и ее флуктуации в смысле случайных состояний. Для первого случая используется термин *флуктуация*, для второго – *отклонение*.

Результатами параграфа являются следующие факты:

- среднее значение меры E_{Hmin} *возрастает линейно* с ростом числа кубитов n ;
- среднеквадратичное отклонение меры E_{Hmin} *экспоненциально убывает* относительно числа кубитов. Уже для $n = 14$ среднеквадратичное отклонение составляет примерно 0.0009 и сопоставимо с точностью вычислений.
- флуктуация меры E_{Hmin} *возрастает* пока $n \leq 6$, начиная с $n = 6$ флуктуация *начинает убывать* и, судя по графику, *стремится к некоторому предельному значению* близкому к 0.8, однако, для подтверждения этого факта желательное аналитическое доказательство.
- среднеквадратичное отклонение флуктуации *экспоненциально убывает* относительно числа кубитов. Уже для $n = 14$ среднеквадратичное отклонение составляет примерно 0.002 и сопоставимо с точностью вычислений.

Четвертая глава посвящена проверке гипотез о квантовой запутанности при помощи методов оптимизации.

Нередко некоторые математические предположения можно представить в виде задач глобальной оптимизации. Соответственно, удобно перед попыткой аналитического доказательства или опровержения гипотезы проверить ее численно с использованием современных методов оптимизации. Конечно, проверки при помощи методов оптимизации не могут служить строгим доказательством, однако, они помогают быстро и с очень большой вероятностью указать на правильность предположения или построить контрпример. В первом параграфе главы приводятся несколько примеров таких проверок, сделанных при работе над диссертацией. Все примеры относятся к проверке лемм и теорем первой главы.

Основным результатом четвертой главы является решение задачи о сущности многочастичной запутанности: можно ли описать многочастичную запутанность лишь при помощи двухчастичной запутанности различных разбиений состояния? С учетом того, что двухчастичная запутанность полностью определяется коэффициентами Шмидта, вопрос состоит в том, полностью ли эти коэффициенты для различных разбиений на две подсистемы определяют и многочастичную запутанность. Приведем точную формулировку задачи на примере многокубитных состояний.

Пусть

$$|\psi_\alpha\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n=0}^1 \alpha_{i_1 i_2 \dots i_n} |i_1 i_2 \dots i_n\rangle$$

и

$$|\psi_\beta\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n=0}^1 \beta_{i_1 i_2 \dots i_n} |i_1 i_2 \dots i_n\rangle$$

– два чистых n -кубитных состояния.

Рассмотрим два утверждения:

(I) Эквивалентность состояний в смысле двухчастичной запутанности.

Состояния $|\psi_\alpha\rangle$ и $|\psi_\beta\rangle$ эквивалентны в смысле двухчастичной запутанности, если для любого разбиения исходного n -кубитного пространства состояний на два подпространства $A = \{k_1, k_2, \dots, k_m\}$ и $B = \{k_{m+1}, \dots, k_n\}$, где $k_i \in \overline{1, n}$, существуют унитарные преобразования U_A и U_B , действующие на подпространствах A и B соответственно, и

$$|\psi_\alpha\rangle = (U_A \otimes U_B) |\psi_\beta\rangle. \quad (5)$$

Данное условие эквивалентно равенству коэффициентов Шмидта состояний $|\psi_\alpha\rangle$ и $|\psi_\beta\rangle$ для всевозможных разбиений n -кубитного пространства состояний на два подпространства.

(II) Эквивалентность состояний относительно многокубитной запутанности.

Состояния $|\psi_\alpha\rangle$ и $|\psi_\beta\rangle$ эквивалентны в смысле многокубитной запутанности, если существует унитарное незапутывающее преобразование $U_l = U_1 \otimes U_2 \otimes \dots \otimes U_n$ ($U_i, i \in \overline{1, n}$ – однокубитные и действуют на i -й кубит соответственно), такое, что

$$|\psi_\alpha\rangle = U_l |\psi_\beta\rangle. \quad (6)$$

Очевидно, что $(II) \Rightarrow (I)$. Соответственно, нас интересует, обратное: следует ли из эквивалентности состояний относительно двухчастичной запутанности их эквивалентность относительно многочастичной запутанности, т.е.

$$(I) \stackrel{?}{\Rightarrow} (II). \quad (7)$$

В работе описывается численный способ проверки такого утверждения. В результате проверки был построен контрпример, а именно два состояния, имеющие одинаковые коэффициенты Шмидта для всех разбиений, но сильно различающиеся значения меры E_{Hmin} . Данный контрпример показывает невозможность описания многочастичной запутанности при помощи двухчастичной, а также, что мера E_{Hmin} не выражается через коэффициенты Шмидта, т.е. является существенно-многочастичной.

В заключении приводятся результаты работы.

Основными результатами, выносимыми на защиту, являются:

1. Построена мера запутанности многочастичных квантовых состояний, опирающаяся на статистику локальных измерений квантовой системы. Доказано, что данная мера обладает всеми необходимыми свойствами меры запутанности для фиксированных размерностей пространства частиц, а также является продолжением редуцированной энтропии фон Неймана и аддитивна в смысле добавления частиц. Данная мера распространена на случай многих идентичных фермионов. Показано, что для двух фермионов мера совпадает с энтропией разложения Слэйтера.
2. Построен и реализован в виде программного комплекса метод вычисления представленной меры. Вычисление меры для многокубитных состояний реализовано с использованием технологии вычислений на графических адаптерах.
3. В результате вычисления представленной меры для различных состояний показано, что среднее значение меры для случайных состояний

линейно возрастает с увеличением числа частиц, а ее среднеквадратичное отклонение экспоненциально убывает. Также показано, что вид динамики меры в алгоритме Гровера сохраняется для различного числа кубитов.

4. Построен контрпример, доказывающий тот факт, что многочастичная запутанность не может быть описана при помощи двухчастичной на основе коэффициентов Шмидта для любых разбиений состояния на две подсистемы.

Список публикаций

- A1. Valiev K., Akulin V., Chernyavskiy A. et al. Ion trap quantum computations: control and success criterion // Quantum computers and computing. 2006. Vol. 6, no. 1. Pp. 107–124.
- A2. Chernyavskiy A. Multiparticle analogue of Schmidt coefficients // Quantum Computers and Computing. 2008. Vol. 8, no. 1. Pp. 141–148.
- A3. Чернявский А. Вычислимая мера квантовой запутанности многокубитных состояний // Микроэлектроника. 2009. Т. 38, № 3. С. 217–223.
- A4. Чернявский А. Неэквивалентность двухчастичной и многочастичной квантовой запутанности // Микроэлектроника. 2009. Т. 38, № 6. С. 449–451.
- A5. Burkov A., Chernyavskiy A., Ozhigov Y. Algorithmic approach to quantum theory 3: bipartite entanglement dynamics in systems with random unitary transformations // Proceedings of SPIE. Vol. 6264. 2006. P. 62640B.
- A6. Chernyavskiy A. Entanglement Measure for Pure Multiparticle States and Its Numerical Calculation // Тезисы докладов международной конференции «Математическое моделирование и вычислительная физика (ММСР'2009)». 2009. С. 184.
- A7. Chernyavskiy A. Entanglement Measure for Multiparticle States and Its Numerical Calculation // ICMNE-2009, Book of Abstracts. 2009. С. q3–07.
- A8. Чернявский А. Использование технологии nVidia CUDA для вычисления меры многочастичной квантовой запутанности // Научно-практическая конференция «Вычисления с использованием графических процессоров в молекулярной биологии и биоинформатике». Тезисы докладов. 2010. С. 6–7.

Цитированная литература

1. Vidal G. Efficient classical simulation of slightly entangled quantum computations // *Physical Review Letters*. 2003. Vol. 91, no. 14. P. 147902.
2. Kenigsberg D., Mor T., Ratsaby G. Quantum advantage without entanglement // *Quantum Information and Computation*. 2006. Vol. 6, no. 7. Pp. 606–615.
3. Валиев К. А., Кокин А. А. Квантовые компьютеры: надежды и реальность. ПХД, 2001.
4. Ozhigov Y. Constructive approach to quantum computer // *Quantum computers and computing*. 2008. Vol. 7, no. 1. Pp. 133–140.
5. Schrödinger E. Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik // *Naturwissenschaften*. 1935. Vol. 23, no. 49. Pp. 823–828.
6. Vedral V., Plenio M. Entanglement measures and purification procedures // *Physical Review A*. 1998. Vol. 57, no. 3. Pp. 1619–1633.
7. Eisert J., Briegel H. Schmidt measure as a tool for quantifying multiparticle entanglement // *Physical Review A*. 2001. Vol. 64, no. 2. P. 22306.
8. Wong A., Christensen N. Potential multiparticle entanglement measure // *Physical Review A*. 2001. Vol. 63, no. 4. P. 44301.
9. Mandilara A., Akulin V., Smilga A., Viola L. Quantum entanglement via nilpotent polynomials // *Physical Review A*. 2006. Vol. 74, no. 2. P. 22331.
10. Schliemann J., Cirac J., Kuś M. et al. Quantum correlations in two-fermion systems // *Physical Review A*. 2001. Vol. 64, no. 2. P. 22303.
11. Kennedy J., Eberhart R. Particle swarm optimization // *IEEE International Conference on Neural Networks*, 1995. Proceedings. Vol. 4. 1995.
12. Фельдман Э. Б., Юрищев М. А. Флуктуации квантовой запутанности // *Письма в ЖЭТФ*. 2009. Т. 90-1. С. 75–79.