

Вычислительные задачи моделирования элементной базы квантовых компьютеров

Ю.И. Богданов¹, В.Ф. Лукичев¹, А.А. Орликовский¹,

А.С. Холево², А.Ю. Чернявский^{1,3}

¹ Физико-технологический институт РАН.

² Математический институт им. В.А. Стеклова РАН.

³ Московский государственный университет им М.В. Ломоносова
e-mail: bogdanov@ftian.ru

Numerical tasks of quantum computer circuits modeling

Yu.I. Bogdanov¹, V.F. Luckichev¹, A.A. Orlikovsky¹,
A.S. Holevo², A.Yu. Chernyavskiy^{1,3}

¹Institute of Physics and Technology, Russian Academy of Sciences

²Steklov Mathematical Institute, Russian Academy of Sciences

³Lomonosov Moscow State University

Работа посвящена задачам моделирования элементной базы квантовых компьютеров. Дается краткое введение в математический формализм описания квантовых гейтов – аналогов логических элементов для квантового компьютера. Рассматриваются важнейшие задачи моделирования элементной базы квантового компьютера и некоторые примеры их численного решения. Описываются вычислительные особенности таких задач и причины необходимости использования высокопроизводительных систем.

This paper is devoted to tasks of modeling quantum computer circuits. We give a brief introduction to the mathematical formalism of quantum gates (an analog of logic gates of classical computers). We consider important tasks of quantum computer circuits modeling and also some examples of a numerical solution of these tasks. Computational features of such tasks and causes of necessity to use high-performance computational systems are considered.

Введение

В настоящее время активно обсуждаются десятки различных моделей квантовых компьютеров. В числе наиболее перспективных и интересных предложений по реализации квантовых регистров – проекты на ионах в ловушках, на ядерных спинах, на квантовых точках, на фотонах, на зарядовых, потоковых и фазовых состояниях в сверхпроводниковых структурах, на состояниях ридберговских атомов, на квантовых состояниях вакансионных центров в алмазе и др. [1-4]. Основное достижение проведённых до сих пор исследований состоит в практической демонстрации справедливости физических принципов, лежащих в основе идеи квантовых вычислений. Основные препятствия на пути реализации концепции полномасштабных квантовых компьютеров состоят в недостаточной разработке соответствующей необходимым требованиям технологии изготовления квантовых регистров, в трудностях измерения и контроля квантовых состояний, а также в обеспечении необходимой степени подавления декогерентизации, обусловленной квантовыми шумами. Достигнутая в настоящее время в экспериментах точность реализации, характеризуемая вероятностью совпадения

между теоретическим и экспериментальным квантовыми состояниями, составляет всего 60-80%, в то время как требуемая точность должна быть 99.99% и более. В связи с вышесказанным возникает очень важная задача моделирования зашумленных квантовых гейтов.

Математический формализм описания квантовых гейтов

Более подробное описание формализма квантовых вычислений и квантовых операций можно найти в [3, 5-7].

Идеальный квантовый компьютер. Основным элементом квантового компьютера является квантовый бит (кубит), представляющий собой двухуровневую квантовую систему. Также как и классический бит, кубит может находиться в двух базисных состояниях $|0\rangle$ и $|1\rangle$. Однако, в отличие от квантовой системы кубит может находиться в суперпозиции этих состояний $c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$, где c_i - комплексные числа, называемые амплитудами; т.е. состояние задается вектором в пространстве C^2 (согласно принятой в физике терминологии, это двумерное гильбертово пространство). Амплитуды имеют вероятностный физический смысл: вероятность обнаружить кубит в состоянии $|i\rangle$ равна $|c_i|^2$. Важный аспект квантовой механики, играющий ключевую роль в квантовых вычислениях, определяется тем фактом, что состояние двух кубитов принадлежит пространству, которое задается тензорным произведением однокубитных пространств $C^2 \otimes C^2$. Общий вид такого состояния будет $c_{00}|00\rangle + c_{01}|01\rangle + c_{10}|10\rangle + c_{11}|11\rangle$. Аналогично, состояние n кубитов лежит в пространстве $(C^2)^{\otimes n}$ и описывается уже $2^{2n} - 2$ действительными числами (два параметра являются избыточными в силу нормировки полной вероятности и не имеющей физического смысла общей фазы $e^{i\varphi}$). Мы видим, что размерность пространства растет экспоненциально, а, соответственно, даже в идеальном случае для моделирования уже небольшого числа кубитов необходимы значительные вычислительные ресурсы.

Аналогом логических элементов классических компьютеров в квантовом случае выступают унитарные преобразования состояний. Как и в классических вычислениях практически важны преобразования, действующие лишь на небольшое число кубитов. Некоторые преобразования, которые также называют *гейтами* имеют классический аналог (например, $NOT = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$), в то время как другие (например,

фазовое преобразование $Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$) такого аналога не имеют. Но даже если некоторое преобразование U действует лишь на несколько кубитов, оно меняет *все* амплитуды n -кубитового квантового состояния. Матрица такого преобразования имеет вид $U \otimes I$, где I - единичная матрица, действующая на незатронутые кубиты. Несмотря на большой размер $2^n \times 2^n$, такая матрица сильно разрежена, что позволяет заметно сокращать вычислительные затраты и используемую память при моделировании.

Зашумленные квантовые гейты. Описанные выше векторы-состояния (или *чистые* состояния) возникают лишь в идеальном случае. При наличии же шумов, возникающих вследствие взаимодействия с окружением, появляется дополнительная стохастическая неопределенность. Теперь состояния системы уже не могут быть

описаны вектором - вместо этого используются так называемые матрицы плотности. Матрицей плотности классической смеси квантовых состояний $|\psi_i\rangle$, взятых с соответствующими вероятностями p_i является матрица $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$.

Рассматриваемые объекты есть неотрицательно-определенные эрмитовы матрицы с единичным следом. Согласно квантовой механике, унитарные преобразования действуют на матрицы плотности следующим образом: $\rho \rightarrow U\rho U^\dagger$. Отметим, что переход от векторов состояния к матрицам плотности приводит к тому, что число параметров, необходимых для хранения состояний, увеличивается квадратично.

Как и векторы-состояния, унитарные преобразования являются лишь идеализацией. Более реалистично преобразования описываются при помощи формализма, развитого в теории открытых квантовых систем. По аналогии с формализмом случайных марковских процессов, с помощью которого обычно описываются ошибки, возникающие в классических компьютерах, квантовый шум с достаточной для многих приложений точностью также представляет собой марковский процесс (только объектом, который подвержен эволюции, является не распределение вероятностей, а матрица плотности). С математической точки зрения такой подход ведет к концепции *вполне положительных преобразований*. Такие преобразования сохраняют положительность матрицы плотности при действии на подсистемы (например, на часть кубитов многокубитной системы). Рассматриваемая концепция в настоящее время широко признана и хорошо обоснована (Краус [8], Линдблад [9], Горини и др. [10], Эванс и Льюис [11] в статистической механике и А.С. Холево [12] в квантовой теории сообщений).

Важно отметить, что вполне положительные отображения могут быть представлены в различных эквивалентных математических формах:

- 1) **Операторы Крауса.** Квантовая эволюция задается операторной суммой $\mathbf{E}(\rho) = \sum_k E_k \rho E_k^\dagger$, где E_k - элементы преобразования (так называемые операторы Крауса), $\sum_k E_k^\dagger E_k = I$.

В пространстве размерности s операторы E_k могут быть представлены матрицами размерности $s \times s$. В случае унитарного преобразования в операторной сумме имеется всего одно слагаемое, задаваемое оператором U .

- 2) **Расширенная динамика.** Неунитарное преобразование, действующее в гильбертовом пространстве размерности s , можно интерпретировать как следствие унитарного преобразования U в пространстве более высокой размерности. Пусть имеется m операторов преобразования E_k ($k = 1, \dots, m$). Тогда унитарная матрица U размерности $ms \times ms$ может быть представлена в следующем блочном виде:

$$U = \begin{pmatrix} E_1 & : & : \\ : & : & : \\ E_m & : & : \end{pmatrix}.$$

Унитарная матрица U описывает взаимодействие вспомогательной m -уровневой системы (среды) с изучаемой физической s -уровневой системой.

Преобразование системы описывается при помощи редукции по окружению:
 $\rho \rightarrow Tr_E(U(\rho \otimes |0_E\rangle\langle 0_E|)).$

- 3) **Изоморфизм Чоя-Ямилковского.** Каждому квантовому преобразованию можно сопоставить некоторую матрицу плотности в пространстве большей размерности

Пусть рассматриваемое квантовое преобразование \mathbf{E} действует на систему A размерности s . Добавим вспомогательную систему B такой же размерности и рассмотрим совместную систему AB , на вход которой подадим состояние:

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{s}} \sum_{j=1}^s |j\rangle \otimes |j\rangle.$$

Здесь первый множитель в тензорном произведении относится к подсистеме B , а второй – к подсистеме A . Пусть в подсистеме B осуществляется тождественное преобразование \mathbf{I} . Тогда, в системе AB будет действовать преобразование $(\mathbf{I} \otimes \mathbf{E})$. Преобразованию \mathbf{E} можно однозначно сопоставить матрицу плотности $\rho_\chi = (\mathbf{I} \otimes \mathbf{E})(|\Phi\rangle\langle\Phi|)$ - состояние Чоя-Ямилковского.

Такое представление весьма важно, т.к. дает возможность использовать хорошо разработанный аппарат анализа матриц плотности для квантовых гейтов.

- 4) **Матрица эволюции.** Пусть входная и выходная матрицы плотности ρ_{in} и ρ_{out} вытянуты в столбцы длины s^2 . Тогда, в силу линейности квантовой операции, можно записать: $\rho_{out} = G\rho_{in}$, где G - некоторая матрица размера $s^2 \times s^2$, называемая *матрицей эволюции*.

Важный частный случай представляют собой однородные во времени марковские процессы. Пусть $G(\Delta t)$ – матрица эволюции системы за время Δt . Тогда N шагов такой эволюции, т.е. эволюция за время $t = N\Delta t$ будет определяться оператором $G(t)$, который имеет следующий простой вид $G(t) = (G(\Delta t))^N$. Такое представление очень удобно для моделирования.

Отметим, что все перечисленные представления могут быть эффективно пересчитаны друг в друга. Различные представления необходимы на различных этапах моделирования: например, для расчета инфинитезимальной операции действующей под влиянием некоторой модели квантового шума необходимы операторы Крауса или расширенная динамика (в зависимости от модели шума). Для расчета гейта на фиксированном времени необходима матрица эволюции. Для дальнейшего анализа полученной модели гейта и сравнения с экспериментом широко используются состояния Чоя-Ямилковского.

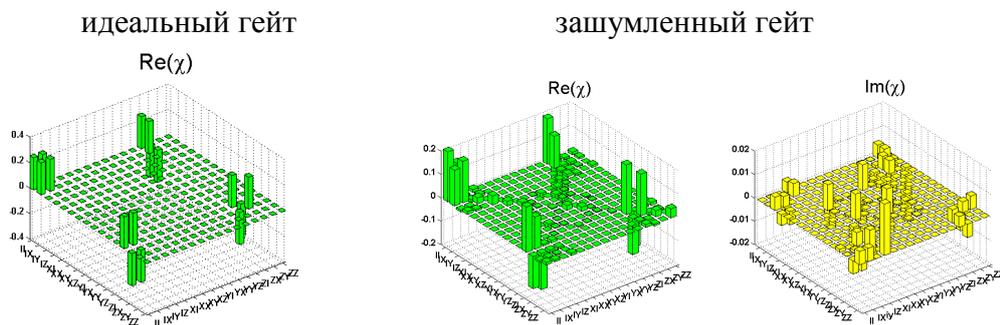
Рассмотрим как растет необходимый для моделирования объем памяти: как можно видеть из пунктов 1-4, переход к зашумленным гейтам эффективно удваивает число рассматриваемых кубитов. Действительно, квантовые n -кубитовые операции сводятся к состояниям Чоя-Ямилковского, которые эффективно представляют собой $2n$ -кубитовые матрицы плотности, в результате оказывается, что для n -

кубитового гейта необходимо оперировать примерно с 2^{4n} комплексными параметрами. В такой же пропорции, естественно, растут и временные вычислительные затраты.

Также отметим еще один важный вычислительный аспект: задачи моделирования квантовых гейтов представляют собой задачи линейной алгебры высокой размерности. Это предоставляет хорошие перспективы для использования готовых суперкомпьютерных программных средств (Scalapack, Matlab distributed computing и т.п.). Кроме этого, рассматриваемые задачи дают широкие возможности для разработки различных алгоритмов вычислительной математики и использования нестандартных методов оптимизации.

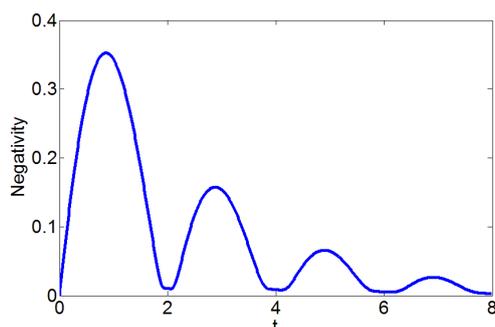
Некоторые задачи моделирования квантовых гейтов

Анализ точности квантовых операций и схем. Как говорилось во введении, для успешного развития квантовых информационных технологий критически важна точность квантовых операций. В связи с этим встает задача моделирования квантовых гейтов и схем с учетом различных моделей квантового шума и дальнейшим анализом точности. Одним из удобных способов является визуальный анализ графического представления матрицы Чоя-Ямилковского. В качестве примера на рисунке представлен идеальный и зашумленный (под действием определенной амплитудной и фазовой релаксации) гейт CNOT (controlled-NOT), который меняет состояние второго кубита в зависимости от состояния первого $CNOT : |i\rangle |j\rangle \rightarrow |i\rangle |i \oplus j\rangle$.



Анализ запутанности квантовых операций и схем.

Важнейшую роль для квантовых информационных технологий играет феномен так называемой квантовой запутанности. Теория запутанности квантовых состояний, хотя и имеет ряд открытых фундаментальных вопросов, достаточно хорошо развита (см., например, [13, 14]). Соответствие между квантовыми операциями и квантовыми состояниями, задаваемое при помощи изоморфизма Чоя-Ямилковского, позволяет использовать аппарат анализа запутанности матриц плотности для квантовых гейтов. Ниже на рисунке представлена временная динамика запутанности гейта CNOT под влиянием фазовой и амплитудной релаксации (контролируемым параметром здесь является так называемая негативность (negativity)).



Очень интересен анализ запутанности не только квантовых гейтов но и различных квантовых схем, например тех, которые задают известные квантовые алгоритмы. Для анализа хотя бы 10-кубитного алгоритма (например, широко известного алгоритма Гровера поиска в базе данных) потребуется работа с матрицами размера $2^{20} \times 2^{20}$ и более, что, очевидно, приводит к необходимости использования новейших высокопроизводительных систем.

Анализ кодов коррекции квантовых ошибок.

Как хорошо известно, классические информационные технологии не могли бы успешно функционировать без наличия развитой теории коррекции ошибок. Это утверждение остается верным и в квантовом случае. Множество квантовых состояний, в отличие от классических, является непрерывным, соответственно, существует и континуум возможных ошибок. Кроме того, отсутствует прямой доступ к амплитудам квантового состояния (т.е. состояние может быть нам неизвестно). Казалось бы, эти два факта должны препятствовать исправлению квантовых ошибок, однако, это не так, и существуют эффективные коды коррекции (см., например, [3,5]).

В теории исправления квантовых ошибок и теории помехоустойчивых квантовых схем рассматриваются схемы коррекции с идеальными гейтами, или же на возможные ошибки внутри схемы накладываются серьезные ограничения, которые сильно ограничивают круг рассматриваемых задач. В этой связи, важной задачей является моделирование квантовых схем коррекции ошибок с учетом более реалистичных и полных моделей декогерентизации.

Минимальный код, исправляющий произвольную ошибку в одном кубите является пятикубитным. Таким образом, для моделирования двухкубитной помехоустойчивой операции (например, CNOT) снова потребуется работа с матрицами размера $2^{20} \times 2^{20}$ и более, что опять же требует использования суперкомпьютеров.

Работа поддержана Программой Президиума РАН в области фундаментальных исследований, а также частично грантом РФФИ № 12-01-31274 мол_а.

Список литературы

1. *Валиев К.А., Кокин А.А.* Квантовые компьютеры: надежда и реальность. Ижевск. РХД. 2001. 352с.
2. *Ю.И.Богданов, К.А.Валиев, А.А.Кокин.* Квантовые компьютеры: достижения, трудности реализации и перспективы // Микроэлектроника. 2011. Т.40. №4. С.243-255.
3. *Нильсен М, Чанг И.* Квантовые вычисления и квантовая информация. М. Мир. 2006. 824 с.
4. *Chen G, Church D.A., Englert B.-G. et al.* Quantum Computing Devices. Principles, Designs, and Analysis. Chapman & Hall. 2007. 542 p.
5. *Прескилл Дж.* Квантовая информация и квантовые вычисления. Том.1. М.-Ижевск. РХД. 2008. 464с.
6. *Богданов Ю.И., Кокин А.А., Лукичев В.Ф. и др.* Квантовая механика и развитие информационных технологий // Информационные технологии и вычислительные системы. 2012. №1. С. 17-31.
7. *Богданов Ю.И., Лукичев В.Ф., Орликовский А.А. и др.* Математическое моделирование влияния квантовых шумов на качествоэлементной базы квантовых компьютеров элементной базы квантовых компьютеров // Труды ФТИАН. 2012. Т.22. В печати.
8. *K. Kraus* States, Effects, and Operations: Fundamental Notions of Quantum Theory. Lecture Notes in Physics, V. 190. Springer- Verlag. Berlin. 1983. 151 p.
9. *Lindblad G.* Completely positive maps and entropy inequalities// Commun. Math. Phys. 1975. V.40. P.147-151
10. *Gorini V., Frigerio A., Verri M., Kossakowski A., Sudarshan E. C. G.* Properties of quantum Markovian master equations // Rep. Math. Phys. 1978. V. 13. P. 149-173.
11. *Evans D. E., Lewis J. T.* Dilations on irreversible evolutions in algebraic quantum theory // Commun. Dublin Inst. Adv. Stud. Ser. A 24. Dublin. 1977.
12. *Холево А.С.* К математической теории квантовых каналов связи // Проблемы передачи информации. 1972. Т.8. №1. С. 63-71.
13. *Холево А.С.* Квантовые системы, каналы, информация. М.: МЦНМО 2010. 327 с.
14. *Horodecki, R., Horodecki, P., Horodecki, M., and Horodecki, K.* Quantum entanglement. // Reviews of Modern Physics, 81(2). 2009. P. 865; arXiv:quant-ph/0702225

Сведения об авторах

Yuri Bogdanov,

Affiliation: Institute of Physics and Technology, Russian Academy of Sciences

Position: Head of Quantum computers Laboratory.

Graduated from Department of Physics, Lomonosov Moscow State University in 1986

Doctor of Sciences in Physics and Mathematics.

Author of more than 120 scientific publications.

Research interests: quantum information science, physics of quantum computers.

e-mail: bogdanov@ftian.ru , phone: +7-499-129-6366

Богданов Юрий Иванович,

Место работы: Физико-технологический институт Российской академии наук (ФТИАН)

Должность: заведующий лабораторией физики квантовых компьютеров.

Окончил физический факультет Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова в 1986 г.

Доктор физико-математических наук.

Автор более 120 научных трудов.

Область научных интересов: квантовая информатика, физика квантовых компьютеров.

e-mail: bogdanov@ftian.ru , тел: +7-499-129-6366

Vladimir Lukichev,

Affiliation: Institute of Physics and Technology, Russian Academy of Sciences

Position: Deputy Director for Science.

Graduated from Department of Physics, Lomonosov Moscow State University in 1978.

Doctor of Sciences in Physics and Mathematics, Professor, Corresponding Member of Russian Academy of Sciences.

Author of more than 70 scientific papers.

Research interests: physics of superconductors, Microelectronics

e-mail: lukichev@ftian.ru , phone: +7-499-129-5492

Лукичев Владимир Федорович

Место работы: Физико-технологический институт Российской академии наук (ФТИАН)

Должность: заместитель директора по научной работе.

Окончил физический факультет Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова в 1978.

Доктор физико-математических наук, профессор, член- корреспондент РАН.

Автор более 70 научных трудов.

Область научных интересов: физика сверхпроводников, микроэлектроника

e-mail: lukichev@ftian.ru , тел: +7-499-129-5492

Alexander Orlikovsky,

Affiliation: Institute of Physics and Technology, Russian Academy of Sciences

Position: Director.

Graduated from Moscow Engineering Physics Institute in 1961.

Doctor of Technical Sciences, Professor, Academician of Russian Academy of Sciences.

Author of more than 300 scientific papers, including two monographs.
Research interests: micro - and nano-electronics, MOS transistors with channel lengths of 10 nm, including quantum description of the characteristics of such transistors, solid-state quantum computer technology.
e-mail: orlikovsky@ftian.ru , phone: +7-499-129-5004

Орликовский Александр Александрович,
Место работы: Физико-технологический институт Российской академии наук (ФТИАН)
Должность: директор.
Окончил Московский инженерно-физический институт в 1961.
Доктор технических наук, профессор, академик РАН.
Автор свыше 300 научных трудов, в том числе 2 монографий.
Область научных интересов: технологии кремниевой микро - и нанoeлектроники, в том числе технологии МДП-транзисторов с длинами канала порядка 10 нм, включая квантовое описание характеристик таких транзисторов; технологии твердотельных квантовых компьютеров.
e-mail: orlikovsky@ftian.ru ,тел: +7-499-129-5004

Alexander Holevo,
Affiliation: Steklov Mathematical Institute, Russian Academy of Sciences
Position: Leading Research Fellow.
Graduated from Moscow Institute of Physics and Technology in 1966.
Doctor of Sciences in Physics and Mathematics, Professor.
Author of more than 170 scientific papers, including 5 monographs.
Research interests: quantum information, communication and computing, noncommutative probability theory, quantum and classical stochastic processes, quantum markov property and dynamical semigroups, statistical structure of quantum theory, quantum measurement
e-mail: holevo@mi.ras.ru, phone: +7-499-135-0480

Холево Александр Семенович,
Место работы: Математический институт им. В.А. Стеклова РАН (МИАН)
Должность: ведущий научный сотрудник
Окончил Московский физико-технический институт в 1966.
Доктор физико-математических наук, профессор.
Автор свыше 170 научных трудов, в том числе 5 монографий.
Область научных интересов: квантовая теория информации, квантовые вычисления, некоммутативная теория вероятностей, квантовые случайные процессы, динамические (марковские) полугруппы, статистическая структура квантовой теории, квантовые измерения
e-mail: holevo@mi.ras.ru, тел: +7-499-135-0480

Andrey Chernyavskiy
Affiliation: Institute of Physics and Technology, Russian Academy of Sciences.
Position: Research Fellow.
Graduated from the Department of Computational Mathematics and Cybernetics, Lomonosov Moscow State University in 2005
Ph.D. in Physics and Mathematical Sciences.

Author of more than 10 scientific papers
Research interests: quantum computing, quantum entanglement, artificial intelligence,
parallel computing
e-mail: andrey.chernyavskiy@gmail.com , phone: +7-499-129-6366

Чернявский Андрей Юрьевич

Место работы: Физико-технологический институт Российской академии наук
(ФТИАН)

Должность: научный сотрудник.

Окончил факультет вычислительной математики и кибернетики Московского
государственного университета им. М. В. Ломоносова 2005 г.

Кандидат физико-математических наук.

Автор более 10 научных работ

Область научных интересов: квантовые вычисления, квантовая запутанность,
искусственный интеллект, параллельные вычисления

e-mail: andrey.chernyavskiy@gmail.com тел: +7-499-129-6366