

# 量子纠缠，量子计算与 量子模拟

施郁

复旦大学物理学系

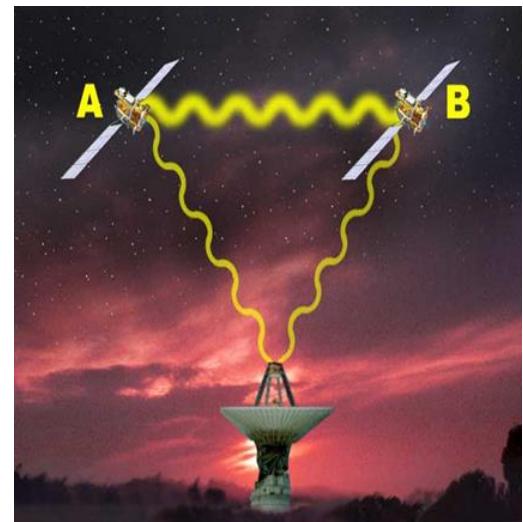
中科院高能物理研究所

2022. 5. 18.

# 量子纠缠

$$|\Psi\rangle_{12} = |\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 + |\leftrightarrow\rangle_1 |\leftrightarrow\rangle_2$$

- 两个双光子态的叠加，其中一个双光子态中，光子<sub>1</sub>水平偏振，光子<sub>2</sub>也水平偏振；在另一个双光子态中，光子<sub>1</sub>竖直偏振，光子<sub>2</sub>也竖直偏振。
- 这个量子纠缠态：每个光子都没有一个独立的偏振量子态。
- 与二者之间距离无关（只要保持这个态）。



# 起源：爱因斯坦

- 爱因斯坦：承认量子力学的正确性，但是责疑它的完备性：是不是客观实在的每个元素都在量子力学中有对应。
- 1935年，爱因斯坦-波多尔斯基-罗森首次揭示量子纠缠的深刻意义，通过量子纠缠来，论证局域实在论与量子力学不和谐（虽然后来实验不支持他们主张的局域实在论）



◎施郁：量子计算

薛定谔：  
量子纠缠是量子力学的特征。

- 薛定谔1935： I would not call that one but rather **the characteristic** trait of quantum mechanics, the one that enforces its entire departure from classical lines of thought . By the interaction the two representatives become **entangled**.



◎施郁：量子计算

# 用光子偏振重述EPR的论证

$$|\Phi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\leftrightarrow\rangle|\leftrightarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle|\uparrow\downarrow\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\swarrow\rangle|\swarrow\rangle + |\nwarrow\rangle|\nwarrow\rangle)$$

- A测量光子<sub>1</sub>的偏振是水平还是竖直。
- 如果A测到光子<sub>1</sub>的偏振是水平（竖直），A可以明确（100%概率）预言光子<sub>2</sub>的偏振也是水平（竖直）。
- 光子<sub>2</sub>与<sub>1</sub>相距类空距离（没有物理信号传递）。相对论（局域性）：在某处的测量不会影响到类空远的地方。
- 实在性：物理量有预先客观确定的值；判据：在不扰动的情况下（类空距离能保证），能明确预言物理量的值。
- 因此光子<sub>2</sub>的水平-竖直偏振性质是一个实在元素（事先就确定了）。

# 但是，可以选择不同的测量方式

$$|\Phi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\leftrightarrow\rangle|\leftrightarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle|\uparrow\downarrow\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\nearrow\rangle|\nearrow\rangle + |\nwarrow\rangle|\nwarrow\rangle)$$

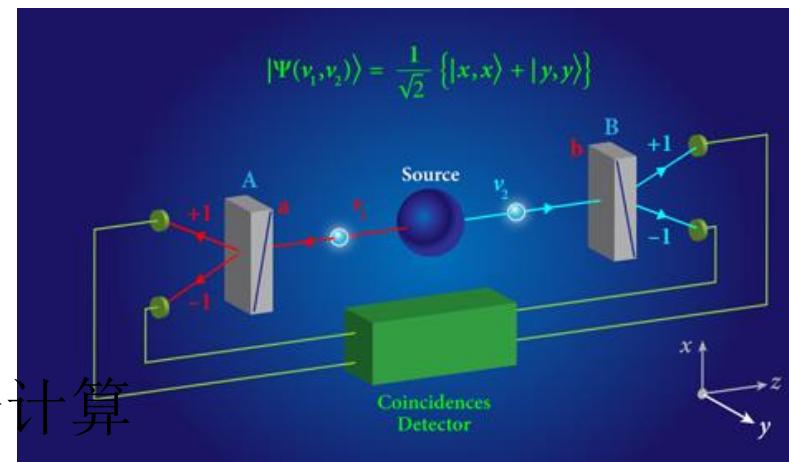
- A测量光子<sub>1</sub>的偏振45度还是135度。
- 如果A测到光子<sub>1</sub>的偏振是45度（135度），A可以明确（100%概率）预言光子<sub>2</sub>的偏振也是45度（135度）。
- <sub>2</sub>与<sub>1</sub>相距类空距离（没有物理信号传递）。
- 因此光子<sub>2</sub>的45度-135度偏振性质也是一个实在的元素（事先就确定了）。

# EPR：量子力学不完备

- 量子力学：光子偏振量子态是|水平>或|竖直>时，测量到45度或135度都有可能；反过来也是。
- 因此根据量子力学，水平-竖直和45度-135度不能同时是实在元素。
- 所以局域性+实在性与量子力学完备性矛盾(√)。
- EPR认为局域性加实在性是无可动摇的(X)，结论：量子力学不完备。

# 贝尔不等式

- 1964年，贝尔提出局域实在论所服从的不等式。而量子纠缠态违反贝尔不等式。
- 实验上，违反贝尔不等式。
- 2003年，Leggett推广到一种非局域实在论满足的Leggett不等式。也被量子力学违反。



◎施郁：量子计算

# 粒子物理中的纠缠粒子

- 例如，正负电子碰撞，得到一个共振态，再衰变得到纠缠正反粒子对。

$$|\Psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|M^0\rangle|\bar{M}^0\rangle \pm |\bar{M}^0\rangle|M^0\rangle). \quad M \text{ 是中性赝标量介子: } K, B, D.$$

- 1GeV:  $\phi$ 共振，产生K。

- 10GeV:  $\gamma$ 共振，产生B。

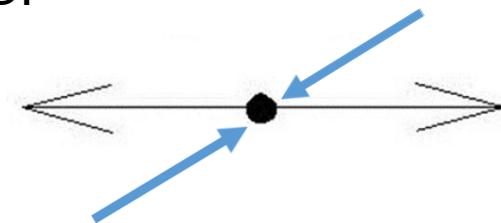
- 3.773GeV:  $\psi$ 共振，产生D。

- 正反粒子态构成2维空间，类似自旋或偏振。

- 可以用于研究分立对称性。例如：YS and JC Yang, Time reversal symmetry violation in entangled pseudoscalar neutral charmed mesons, Physical Review D 98, 075079 (2018).

- Leggett不等式违反：YS and JC Yang, Particle physics violating cryptononlocal realism, European Physical Journal C 80, 861 (2020).

- 超子自旋纠缠用于Bell不等式：YS and JC Yang, Entangled baryons: violation of inequalities based on local realism assuming dependence of decays on hidden variables, European Physical Journal C 80, 116 (2020).



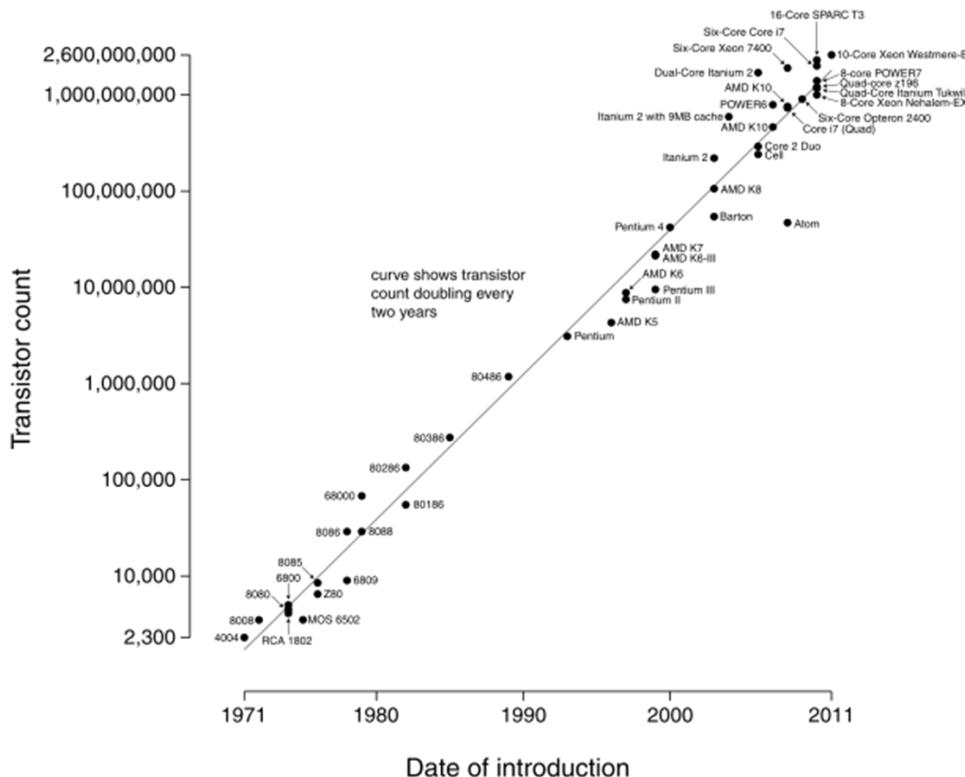
# 量子计算

©施郁：量子计算

# 计算机越来越小、越来越快

- 1950s: 每秒1000次浮点运算。
- 现在: 每秒  $10^{14}$  次浮点运算。 (最快:  $148.6 \times 10^{12}$ )
- Moore's Law, 1965: 单个集成电路芯片上的晶体管数目大约每两年翻一番。

Microprocessor Transistor Counts 1971-2011 & Moore's Law



# 摩尔定律的物理极限

- 单个比特将只需要原子尺寸。
- 但是在原子尺寸，**量子效应**将起支配作用。
- Moore定律也就不能延续。

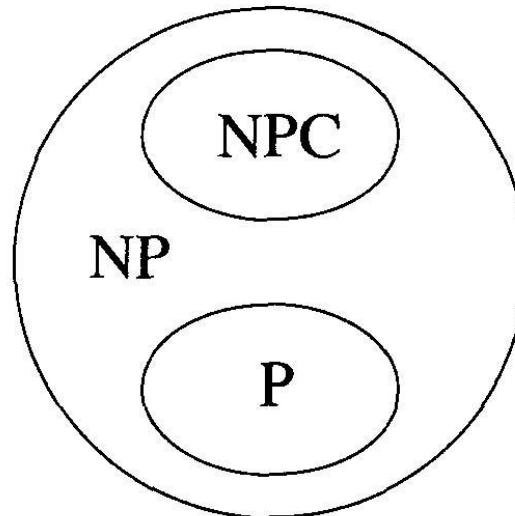
# 变不利为有利

- 干脆用量子力学原理作为新的计算（逻辑）原理。
- 利用量子力学的基本原理（特别是量子态叠加原理），完成计算任务，处理和传递信息。
- 这就是量子计算与量子信息。

# 计算复杂类

- P类 (polynomial time) : 可以多项式时间内解决。
- NP (nondeterministic polynomial time) 类: 可以多项式时间内验证。如: 整数分解。
- $P \subseteq NP$
- 推测:  $P \neq NP$
- NP完全 (NPC) : 任何NP问题都可多项式地约化为它。如: 推销员问题。
- 整数分解不属于NPC。

- 推测(尚未证明)。



- 空间资源。 PSPACE。
- $P \subseteq NP \subseteq PSPACE$

# BQP

- BPP (bounded-error probabilistic polynomial time, 有限误差的概率多项式时间) : 存在多项式时间的算法, 使得正确概率大于 $\frac{1}{2} + \delta, \delta > 0$
- BQP (bounded-error quantum polynomial time, 有限误差的量子概率多项式时间) : 存在多项式时间的量子算法, 使得正确概率大于 $\frac{1}{2} + \delta, \delta > 0$
- 已知:  $P \subseteq BPP \subseteq BQP \subseteq PSPACE$
- 因此量子计算更强大。但是BPP与NP、BQP与NP的关系还不知道。

# 量子计算的兴起

- 1982年，费曼提出，用经典计算机模拟量子过程需要指数级资源，而量子计算机则可以有效地模拟量子过程。
- 1985年，David Deutsch提出量子图灵机和普适量子图灵机的概念。
- 1989年，David Deutsch又提出由量子门组成的量子计算的线路模型。

# 量子算法

- Peter Shor 1994: 有效解决素数因子分解（寻找奇数的素数因子）的量子算法。
- 经典 (NP) :  $\exp\left(O\left(n^3(\log n)^{\frac{2}{3}}\right)\right)$
- n: 数的位数
- Shor的量子算法:  $O(n^2 \log n \log \log n)$
- f=O(g)的意思:  $|f/g|$ 介于两个有限正数之间

©施郁: 量子计算



# n个量子比特的量子态

- 经典比特(经典计算机的状态):  $(i_{n-1}, \dots, i_0)$ .  
可表示为十进制数:

$$i = i_{n-1}2^{n-1} + \dots + i_12 + i_0.$$

- n个量子比特的基矢态:  $|i_{n-1}\rangle|i_{n-2}\rangle\dots|i_1\rangle|i_0\rangle$ . 也可用十进制数表示:  
 $|i\rangle$ .
- 一般的量子态:

$$|\psi\rangle = \sum_{i_{n-1}=0}^1 \dots \sum_{i_0=0}^1 c_{i_{n-1}, \dots, i_1, i_0} |i_{n-1}\rangle|i_{n-2}\rangle\dots|i_1\rangle|i_0\rangle = \sum_{i=0}^{2^n-1} c_i |i\rangle.$$

- $|\psi\rangle$ 一般同时涉及 $2^n$ 个不同的数*{i}*, 是 $2^n$ 维Hilbert space中的态矢.  
需要 $2(2^n - 1)$ 个独立实参数来刻画.

# 量子计算

- 量子力学叠加原理→量子并行.
- 经典波不能实现量子计算. 虽然可以叠加, 但是没有纠缠.
- 没有纠缠的态:  $|\phi\rangle = (\sum_{i_{n-1}=0}^1 c_{i_{n-1}} |i_{n-1}\rangle) \dots (\sum_{i_0=0}^1 c_{i_0} |i_0\rangle)$ .
- 而量子算法利用了纠缠态.
- 量子计算的基本步骤:
  - a. 制备于某个“基准态”, 如 $|00\dots 0\rangle$ .
  - b. 操控量子态, 执行幺正变换 $|\psi_f\rangle = U|\psi_i\rangle$ .
  - c. 在某特定基(计算基)上测量.
- $n$ 量子比特的演化由 $2^n \times 2^n$  幺正矩阵描述. 它可以分解成若干单比特及双比特的幺正运算(量子门).

# 单比特量子门

- 2维的么正变换.  $2 \times 2$ 么正矩阵.

- Hadamard门:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$$

$$H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$$

- 相移门:

$$R_z(\delta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\delta} \end{pmatrix}.$$

$$\begin{cases} R_z(\delta)|0\rangle = |0\rangle, \\ R_z(\delta)|1\rangle = e^{i\delta}|1\rangle. \end{cases}$$

- Hadamard 门  
相移门      }
- 可组合实现任何单比特么正运算.

# 受控非门(CNOT)

- 双量子比特:  $|\psi\rangle = \alpha|00\rangle + \beta|01\rangle + \gamma|10\rangle + \delta|11\rangle$ .
- 制备纠缠态, 需要量子比特之间的相互作用, 从而实现双量子比特门.
- 对基矢态而言:  $CNOT|x\rangle|y\rangle = |x\rangle|x \oplus y\rangle$ .

$$CNOT|00\rangle = |00\rangle, CNOT|01\rangle = |01\rangle, CNOT|10\rangle = |11\rangle, CNOT|11\rangle = |10\rangle$$

其中:

$$|00\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |01\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |10\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |11\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

$$CNOT = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

# CNOT的性质

量子门的亮点：可作用到任意叠加态，如：

$$CNOT(a|00\rangle + b|01\rangle + c|10\rangle + d|11\rangle) = a|00\rangle + b|01\rangle + c|11\rangle + d|10\rangle.$$

可验证： $(CNOT)^2 = 1$ . 与经典一样(因为对任意基矢态都这样). 也可以用矩阵证明。

CNOT可产生纠缠：

$$CNOT(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)|0\rangle = \alpha|00\rangle + \beta|11\rangle.$$

# 通用量子门

- 经典计算中, {与非门, 复制门}是一组通用门.
- 量子计算也是类似地存在通用门集合, 从而 $n$ 个量子比特的任意幺正变换可以分解为单比特和双量子比特门.
- 在经典计算中不能用单比特和双比特可逆门构成通用集。
- 可以证明: 量子计算中, 单量子比特门和双量子比特的受控非门(CNOT)组成通用门集合。
- 也可以证明: 任何单量子比特门可以由Hadamard门和 $R_z(\delta = \pi/4)$ 的相移门(或称 $\pi/8$ 门)实现。

# 函数赋值

- $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}$ ,  $(x_{n-1} \dots x_0) \rightarrow f(x_{n-1} \dots x_0)$ , 即  $x \rightarrow f(x)$ .
- 在量子计算中:  $U_f|x, y\rangle = |x, y \oplus f(x)\rangle$ ,  
即  $U_f|x_{n-1} \dots x_0\rangle|y\rangle = |x_{n-1} \dots x_0\rangle|y \oplus f(x_{n-1} \dots x_0)\rangle$ .
- 可以证明,  $U_f$  是幺正的 (所以可以用量子过程实现)。
- 量子并行:

$$U_f \sum_{x=0}^{2^n-1} c_x |x\rangle|y\rangle = \sum_{x=0}^{2^n-1} c_x |x\rangle|y \oplus f(x)\rangle.$$

# Deutsch算法：判断函数是常数的还是平衡的

- 最早的量子算法，显示了量子计算的强大能力.
- 考虑一个单比特函数：

$$f : \{0, 1\} \rightarrow \{0, 1\}.$$

- 4种函数： $f_0, f_1, f_2, f_3$ .

x	$f_0$	$f_1$	$f_2$	$f_3$
0	0	0	1	1
1	0	1	0	1

- $f_0$ 和 $f_3$ 是常数的(constant).
- $f_1$ 和 $f_2$ 是平衡的(balanced)：函数值取0 和取1 的x的个数一样多(都是1 个).
- 问题；确定某个函数是常数的还是平衡的.
- 经典算法：需做两次查询. (检查 $f(0) = ?$  和 $f(1) = ?$ )
- 量子计算：只需一次查询,或者说运行一次计算.

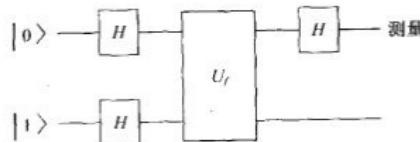
# Deutsch算法中用到的关键

- $U_f|x\rangle|y\rangle = |x\rangle|y \oplus f(x)\rangle.$
- 当  $f(x) = 0$  时,  $y$  不变, 即:  $U_f|x\rangle|y\rangle = |x\rangle|y\rangle.$
- 当  $f(x) = 1$  时,  $y$  翻转, 即:  $|x\rangle|0\rangle \rightarrow |x\rangle|1\rangle$  或  $|x\rangle|1\rangle \rightarrow |x\rangle|0\rangle.$
- 因此可以统一写成:

$$U_f|x\rangle(|0\rangle - |1\rangle) = (-1)^{f(x)}|x\rangle(|0\rangle - |1\rangle).$$

这是Deutsch算法的关键。

# 实现Deutsch算法的量子线路图



$$|0\rangle|1\rangle \xrightarrow{H \otimes H} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) =$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \xrightarrow{U_f}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(-1)^{f(0)}|0\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) + \frac{1}{\sqrt{2}}(-1)^{f(1)}|1\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) =$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[(-1)^{f(0)}|0\rangle + (-1)^{f(1)}|1\rangle] \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \xrightarrow{H \otimes I}$$

$$\frac{1}{2}\{[(-1)^{f(0)} + (-1)^{f(1)}]|0\rangle + [(-1)^{f(0)} - (-1)^{f(1)}]|1\rangle\} \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) =$$

$$\begin{cases} \pm|0\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle), & \text{if } f(0) = f(1) \\ \pm|1\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle), & \text{if } f(0) \neq f(1) \end{cases}.$$

测量第1个比特，如得到 $|0\rangle$ ，则说明 $f(x)$ 一定是常数的；如得到 $|1\rangle$ ，则说明 $f(x)$ 一定是平衡的。

# 周期求解与因子分解问题的Shor算法

- Shor算法是量子计算理论的重大突破。所需时间是 $\text{Poly}(\log N)$ .
- 量子算法所需时间是 $\text{Poly}(\log N)$ . Shor 的量子算法： $O(n^2 \log n \log \log n)$ 次操作。运算次数是n的多项式。
- $N$ 的因子分解问题可以转化为求 $f(x) = a^x \bmod (N)$ 的周期 ( $a$ 随机选取为 $0 < a < N$ )，这个转化可以有效地在经典计算机上完成。
- 因此关键是求 $f(x)$ 的周期 $r$ 的量子算法。 $f(x + r) = f(x)$ 。

# 经典纠错

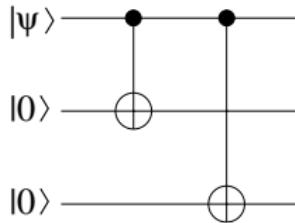
- 利用冗余进行纠错。
- 例如：比特翻转的概率是 $\epsilon$ 。
- Alice用3个重复比特代表原来的比特（000 代表0, 111代表1）,。
- Bob收到讯息后,采用多数原则：2个或3个相同数字代表原来的数字。如010代表0
- 失败概率是 $\epsilon_c = \epsilon^3 + 3\epsilon^2(1 - \epsilon) = 3\epsilon^2 - 2\epsilon^3$ , 当 $\epsilon < 1/2$  时,  $\epsilon_c < \epsilon$ 。  
当 $\epsilon$ 很小时, 约为 $\epsilon$ 的 $3\epsilon$ 倍.

# 量子纠错的困难

- 由于不可克隆原理，未知量子态 $|\psi\rangle$  不能简单重复为 $|\psi\rangle|\psi\rangle|\psi\rangle$ 。
- 经典纠错码中的比特要被观察，量子态的测量往往导致量子态的改变。
- 经典比特的错误就是比特翻转，量子比特的错误各种各样。
- 但是量子纠错有巧妙办法。

# 例：比特翻转和3-量子比特纠错码

- 以概率 $\epsilon$ 发生比特翻转。
- 编码： $|0\rangle \rightarrow |0_L\rangle \equiv |000\rangle$ ,  $|1\rangle \rightarrow |1_L\rangle \equiv |111\rangle$ .  
 $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \rightarrow \alpha|0_L\rangle + \beta|1_L\rangle = \alpha|000\rangle + \beta|111\rangle$ .



A quantum circuit encoding a single qubit into three.

# Bob收到的态

$$\alpha|000\rangle + \beta|111\rangle, \quad (1 - \epsilon)^3$$

$$\alpha|100\rangle + \beta|011\rangle, \quad \epsilon(1 - \epsilon)^2$$

$$\alpha|010\rangle + \beta|101\rangle, \quad \epsilon(1 - \epsilon)^2$$

$$\alpha|001\rangle + \beta|110\rangle, \quad \epsilon(1 - \epsilon)^2$$

$$\alpha|110\rangle + \beta|001\rangle, \quad \epsilon^2(1 - \epsilon)$$

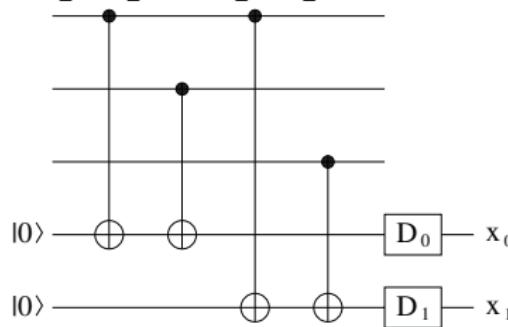
$$\alpha|101\rangle + \beta|010\rangle, \quad \epsilon^2(1 - \epsilon)$$

$$\alpha|011\rangle + \beta|100\rangle, \quad \epsilon^2(1 - \epsilon)$$

$$\alpha|111\rangle + \beta|000\rangle, \quad \epsilon^3$$

# 诊断：集体测量

- 测量  $\sigma_z^{(1)}\sigma_z^{(2)}$  和  $\sigma_z^{(1)}\sigma_z^{(3)}$ .



- $x_0 = 0$  对应于  $\sigma_z^{(1)}\sigma_z^{(2)} = 1$ ,  $x_0 = 1$  对应于  $\sigma_z^{(1)}\sigma_z^{(2)} = -1$ .
- $x_1 = 0$  对应于  $\sigma_z^{(1)}\sigma_z^{(3)} = 1$ ,  $x_1 = 1$  对应于  $\sigma_z^{(1)}\sigma_z^{(3)} = -1$ .
- 例如:  $(\alpha|100\rangle + \beta|011\rangle)|00\rangle \rightarrow (\alpha|100\rangle + \beta|011\rangle)|11\rangle$ .
- 最后两个辅助量子比特的值就是  $x_0$  和  $x_1$ , 称作错误症状。 $x_0 = 1$  说明第一和第二个量子比特之一翻转;  $x_1 = 1$  说明前第一和第三个量子比特之一翻转。因此  $x_0 = x_1 = 1$  说明第一个量子比特翻转。
- 对第一个量子比特用  $\sigma_x$  翻转, 就得到原来的状态。

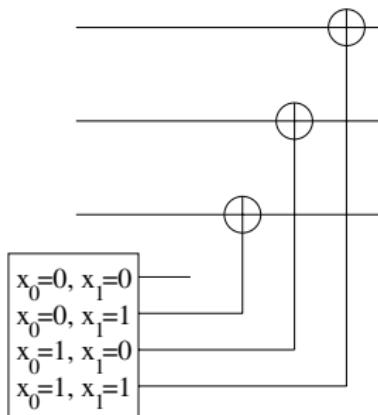
# 纠错

$x_0 = 0, x_1 = 0$ , 无操作,

$x_0 = 0, x_1 = 1$ , 对第三个比特做NOT操作,

$x_0 = 1, x_1 = 0$ , 对第二个比特做NOT操作,

$x_0 = 1, x_1 = 1$ , 对第一个比特做NOT操作.



解码线路：编码线路的逆向。

# 纠错后的态

$$\begin{aligned}
 & (\alpha|000\rangle + \beta|111\rangle)|00\rangle, \quad (1-\epsilon)^3 \\
 & (\alpha|000\rangle + \beta|111\rangle)|11\rangle, \quad \epsilon(1-\epsilon)^2 \\
 & (\alpha|000\rangle + \beta|111\rangle)|10\rangle, \quad \epsilon(1-\epsilon)^2 \\
 & (\alpha|000\rangle + \beta|111\rangle)|01\rangle, \quad \epsilon(1-\epsilon)^2 \\
 & (\alpha|111\rangle + \beta|000\rangle)|01\rangle, \quad \epsilon^2(1-\epsilon) \\
 & (\alpha|111\rangle + \beta|000\rangle)|10\rangle, \quad \epsilon^2(1-\epsilon) \\
 & (\alpha|111\rangle + \beta|000\rangle)|11\rangle, \quad \epsilon^2(1-\epsilon) \\
 & (\alpha|111\rangle + \beta|000\rangle)|00\rangle, \quad \epsilon^3
 \end{aligned}$$

因此有  $\epsilon_c = 3\epsilon^2(1-\epsilon) + \epsilon^3$  的概率，将原来量子态中的  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  互换。这个概率就是两个或三个比特发生翻转的概率。但是当  $\epsilon < 1/2$ ,  $\epsilon_c < \epsilon$ .

# 量子计算的物理实现

- 人们在很多系统中试图实现量子计算。实现量子计算需要满足很多条件，包括：明确的量子比特载体；能很好地实现单比特和双比特门，并能够连接起来；操作时间小于退相干时间；能实现量子测量；能扩展到足够多的量子比特。
- 这些系统有：各种自旋（如：半导体量子点中的电子自旋、硅半导体中的核自旋、金刚石氮空穴）；原子或离子内态；超导Josephson结；等等等等。
- 一个重要指标：相干时间（抗退相干）。
- 有噪声中程量子系统(noisy intermediate scale quantum systems)是目前的前沿，几十到几百个量子比特就可进行量子模拟，体现量子优越性。

# 量子模拟

# 动机

- 作为中程有噪量子技术（Noisy intermediate-scale quantum technology），可以考慮用几十到几百个量子比特，进行量子模拟。
- 适用于既具有量子优越性，又有实用或科研价值的问题。
- 可以用于理论物理的难题。
- 例如格点规范理论（传统方法基于蒙卡，有费米子符号问题；缺少实时动力学）。

# 量子模拟的两条路线

- Analog (模拟) : physical mapping.
- Digital (数字) : 特定目的的量子计算的思路; 往往用到Trotter decomposition:

$$e^{-i(A+B)\frac{t}{n}} \approx e^{-iA\frac{t}{n}} e^{-iB\frac{t}{n}}$$

◎施郁: 量子计算

# 初步实验进展

- 实验上，主要是原子系统. 主要是analog路线。
  - (1+1)D QED or U(1) theory using trapped ions and cold atoms.
  - Gauge invariance in a 71-site quantum simulator of an extended U(1) LGT.
  - Etc.
- Digital路线基本就是特定目标的量子计算。

# 量子模拟的经典模拟 (赝量子模拟)

- 目前的量子模拟实验上的能力还很有限。
- 我们用目前的高性能计算机演示量子模拟过程。
- 本质上当然还是传统的经典计算。
- 但是借此发展量子模拟的理论、算法，也是一种数值计算的新方法。

# Graphics processing unit (GPU) parallel computing architecture

- 我们使用的模拟器: Quantum Exact Simulation Toolkit (QuEST).
- Based on Nvidia's **CUDA** (software platform allowing development of GPU-based parallel program).
- Designed as a **C library**.
- We use it for our pseudoquantum simulation of quantum  $Z_2$  LGT.
- Nvidia V100 GPU: 7.834TFLOPS, double precision, T: 每秒万亿。Nvidia GeForce RTX 3090: 35.7TFLOPS, single precision; 0.556TFLOPS, double precision.

# Quantum $\mathbb{Z}_2$ LGT

- Simplest quantum LGT. Discretization of U(1) theory, also a spin model in condensed matter.
- $\mathbb{Z}2$  toric code is a variant of quantum  $\mathbb{Z}2$  LGT.
- In two spatial dimensions, dual to quantum Ising model in a transverse field.
- Generalization of Ising model, elevating the global up-down symmetry to a **local symmetry**, but without spontaneous symmetry breaking.
- No local order parameter.

# Demanding in present experiments

- $2 \times 2 \times 2$  lattice: 24 links;  $3 \times 3$  lattice: 18 links.
- Tens of thousands steps in Trotter decomposition.
- Demanding requirements on the qubit number, error rate and coherence time.
- We will use 25 qubits and 19 qubits.
- 实验上寄希望于将来。
- 适合做GPU模拟。
- Xiaopeng Cui, YS, Jichong Yang, Circuit-based digital adiabatic quantum simulation and pseudoquantum simulation as new approaches to lattice guage theory, Journal of High Energy Physics 08, 160 (2020) .

# Quantum Z2 Gauge Theory

Local Z2 symmetry,  
which cannot be  
broken

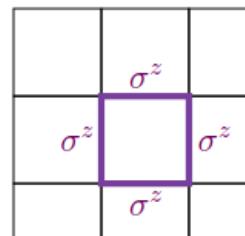
$$\mathcal{H}_{\mathbb{Z}_2} = -K \sum_{\square} \prod_{\ell \in \square} \sigma_{\ell}^z - g \sum_{\ell} \sigma_{\ell}^x,$$

Z2规范算符:

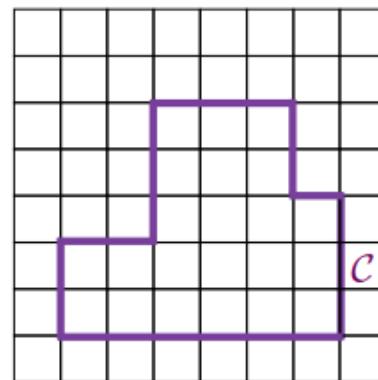
$$G_i = \begin{array}{c|c} \sigma^x & \sigma^x \\ \hline & \sigma^x \end{array}$$

$$G_i^2 = 1$$

$$[H, G_i] = 0$$



1. No Local Symmetry Breaking



2. Topological order in deconfined phase

Deconfined phase  
 $W_c \sim$  Perimeter Law

$$W_c = \prod_c \sigma^z$$

Wegner-Wilson loop  
(gauge inv operator)  
Wc does not commute  
with H unless g=0

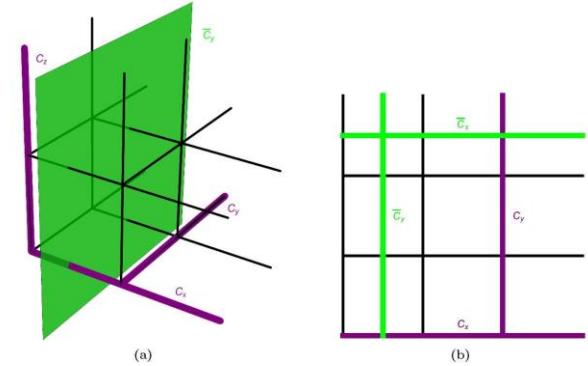
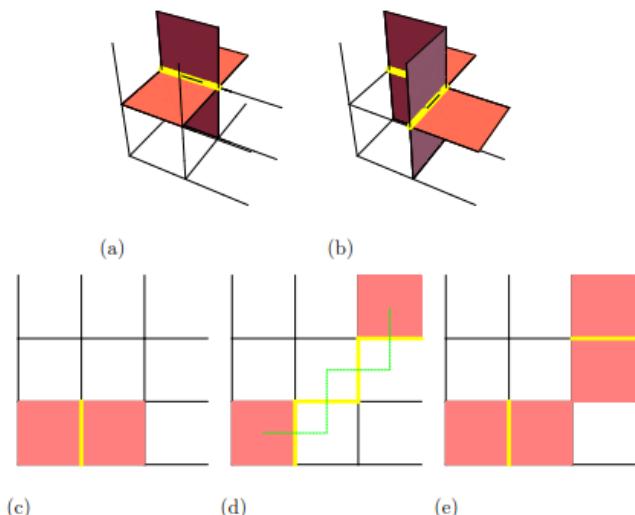
Confined phase  
 $W_c \sim$  Area Law

$-\log W_c$   
proportional  
to the  
perimeter or  
the area.

◎施郁: 量子计算

# Vision and low-lying states

1. Low-lying **particle-like excitations** of the topological phase in the infinite lattice, cannot be created by any local operator (visons).
2. Low-lying **eigenstates** on a torus that cannot be created by local operators.



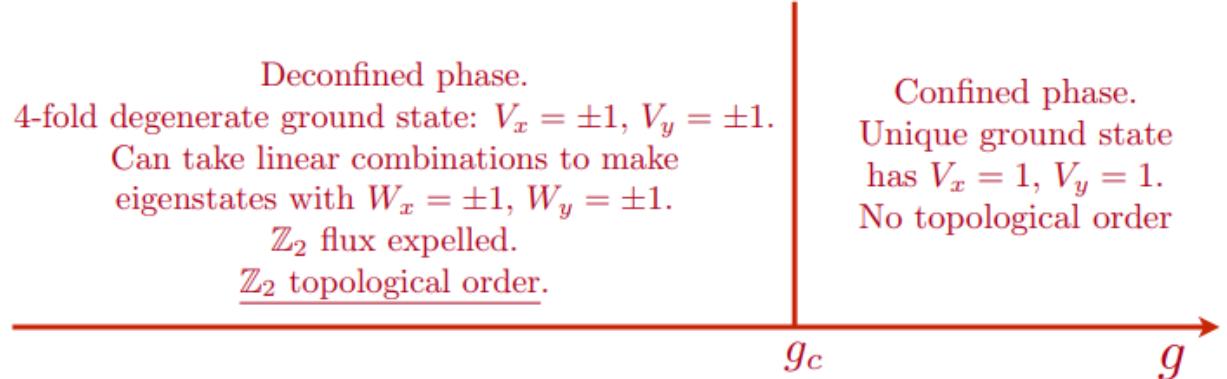
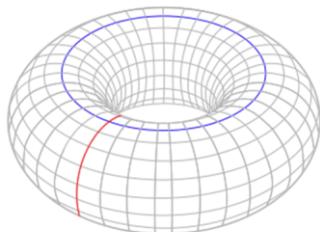
't hooft loops

$$V = \prod_{l \in \bar{C}} \sigma_l^x$$

Commutes with  
Hamiltonian

# quantum phase transition

1. The quantum phase transition is present, the deconfined phase has topological order, while the confined phase is trivial
2. There are stable low-lying excitations of the topological phase in the infinite lattice model which cannot be created by the action of any local operator on the ground state



# 绝热算法

- $H(g = 0) = Z \rightarrow H(g_f=2)$ .
- We generalize Trotter decomposition to the case of adiabatic variation of  $H$ .
- $H$  various in each substep of the Trotter decomposition)

$$H_{k,m} = Z + g_{k,m}X,$$

$$\prod_{m=1}^n e^{-iH_{k,m}\frac{t_s}{n}}$$

$$g_{k,m} = (k-1)g_s + m\delta,$$

$$e^{-iH_{k,m}\frac{t_s}{n}} \approx e^{-iZ\frac{t_s}{n}} e^{-ig_{k,m}X\frac{t_s}{n}},$$

symmetric decomposition

$$e^{-iH_{k,m}\frac{t_s}{n}} \approx e^{-iZ\frac{t_s}{2n}} e^{-ig_{k,m}X\frac{t_s}{n}} e^{-iZ\frac{t_s}{2n}}$$

Error:

$$\text{aymm: } \frac{t_s^2}{n}$$

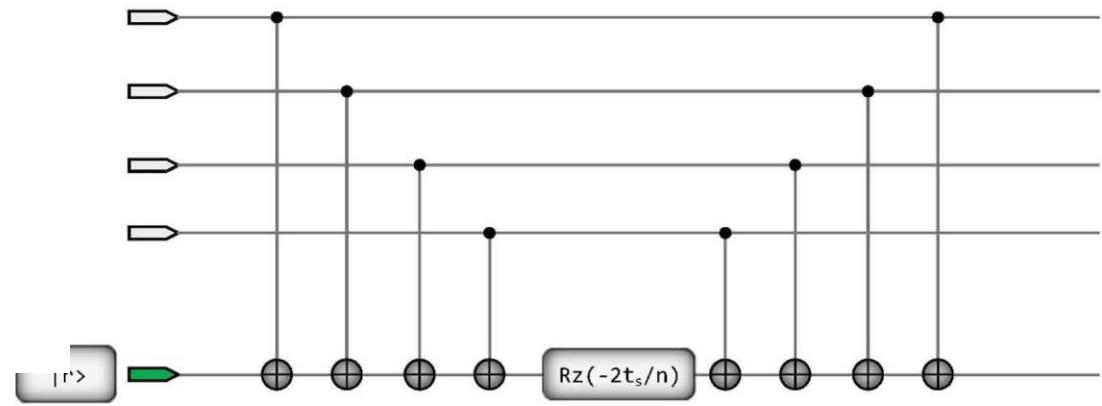
$$\text{symm: } \frac{t_s^3}{n^2}$$

The evolution pauses after a step, calculations or measurements are done

# 用量子线路实现绝热算法 (量子线路由单笔比特和双比特门构成)

$$e^{-iZ_{\square} \frac{t_s}{n}} = A^{-1} R_z^a \left( -2 \frac{t_s}{n} \right) A,$$

$$A = \prod_{l \in \square} CNOT_{l,a},$$



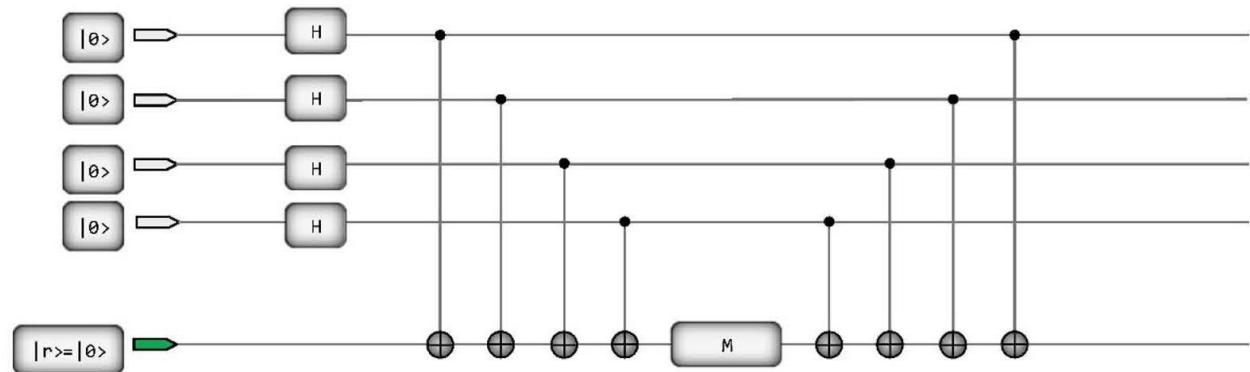
**Figure 3.** The quantum circuit realizing  $e^{-iZ_{\square} t_s/n}$  or  $e^{iZ_{\square} t_s/n}$ , depending on whether the initial or  $|1\rangle$ .

$$e^{-igX \frac{t_s}{n}} = \prod_l e^{-i(-\sigma_l^x)g \frac{t_s}{n}} = \prod_l R_x^l \left( -2g \frac{t_s}{n} \right)$$

Here, as  $Z_{\square}$  and  $\sigma_l^x$  are gauge invariant operators, the evolution operators are gauge invariant in every substep of the digital decompositions.

# 初态制备

- $g=0, H=Z$ .  $Z_{\square} = -1, \forall \square$



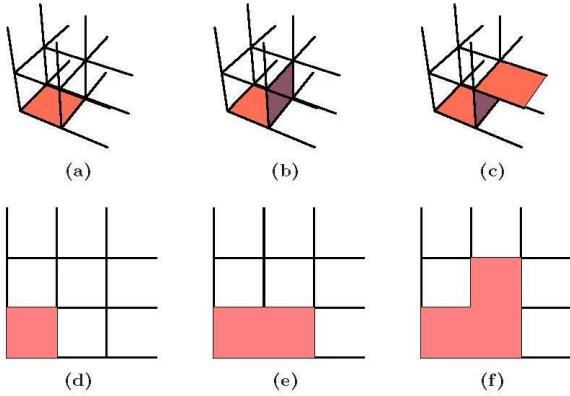
$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|r=0\rangle_a|Z_{\square}=-1\rangle + |r=1\rangle_a|Z_{\square}=1\rangle),$$

# 绝热条件

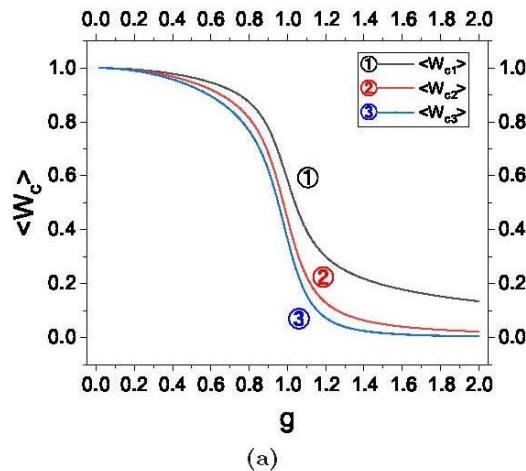
- $\frac{dH}{dt} \approx \frac{g_s}{t_s}$ , should be smaller than the square of the energy gap. In our simulation, it varies from 0.005 to 0.1.
- When  $g \rightarrow 0$ , the excited energy of a pair of visons=4.
- When  $g \rightarrow \infty$ , the gap = $8g$ .
- For general  $g$ , gap  $\sim 1/L \sim 0.5$ .
- V's are conserved, so the vanishingness between the differences between V sectors, in the case infinite L, does not matter.

# Wegner-Wilson loops

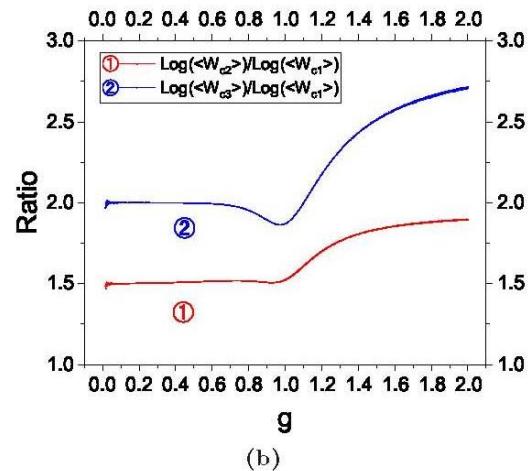
$d=3 \ 2 \times 2 \times 2$



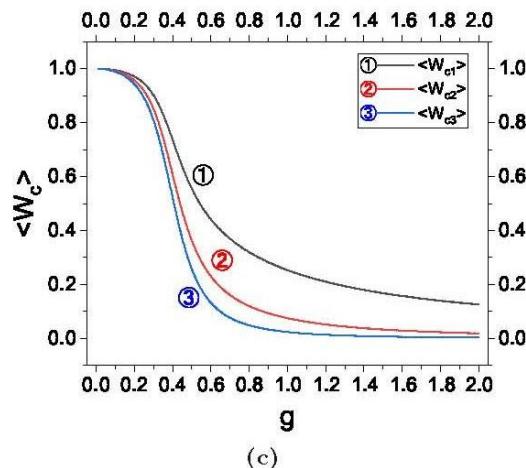
- $g$  small, perimeter law;.
- $g$  large, area law.
- A dip in 3D case.



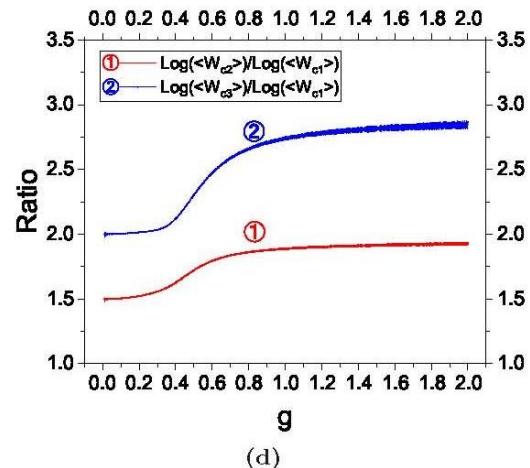
(a)



(b)



(c)



(d)

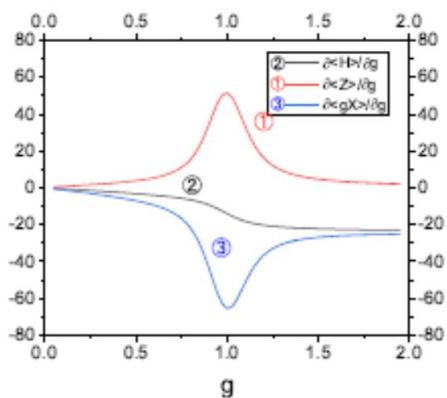
◎施郁：量子计算

$d=2 \ 3 \times 3$

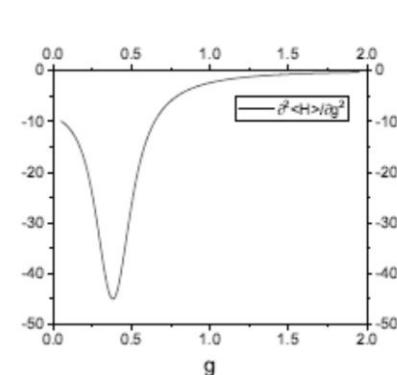
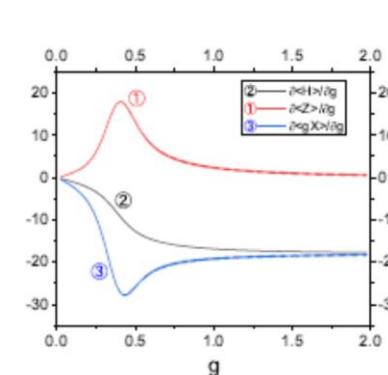
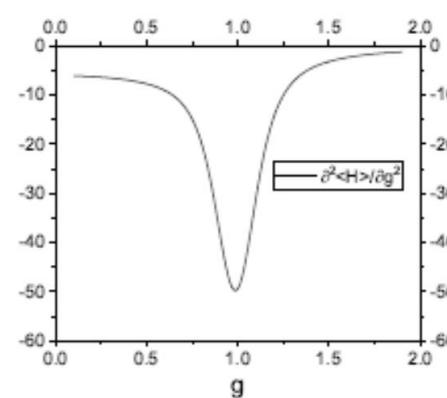
# Critical points

- From the lowest point of the second derivative of  $\langle H \rangle$ ,  $g_c \approx 0.986$ ,  $d = 3$ ;  $g_c \approx 0.380$ ,  $d = 2$ ,

$d=3 \ 2 \times 2 \times 2$

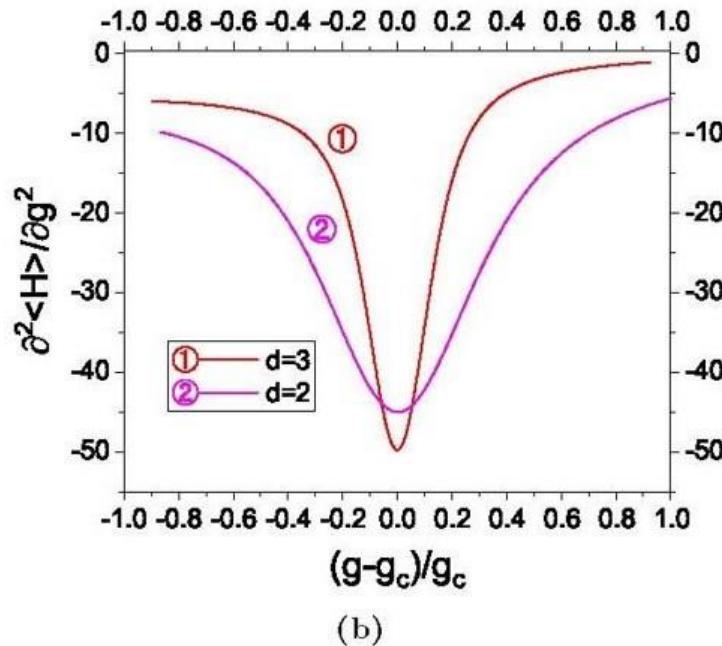


$d=2 \ 3 \times 3$



# Order of QPT

- The thermal phase transition in the classical  $Z_2$  LGT is first-order in 4d, second-order in 3d. This suggests: QPT is first-order in  $d=3$ , and is second-order in 2d.
- Compare  $d=3$  and  $d=2$ , sharper and deeper in  $d=3$ :



# Absence of local symmetry breaking

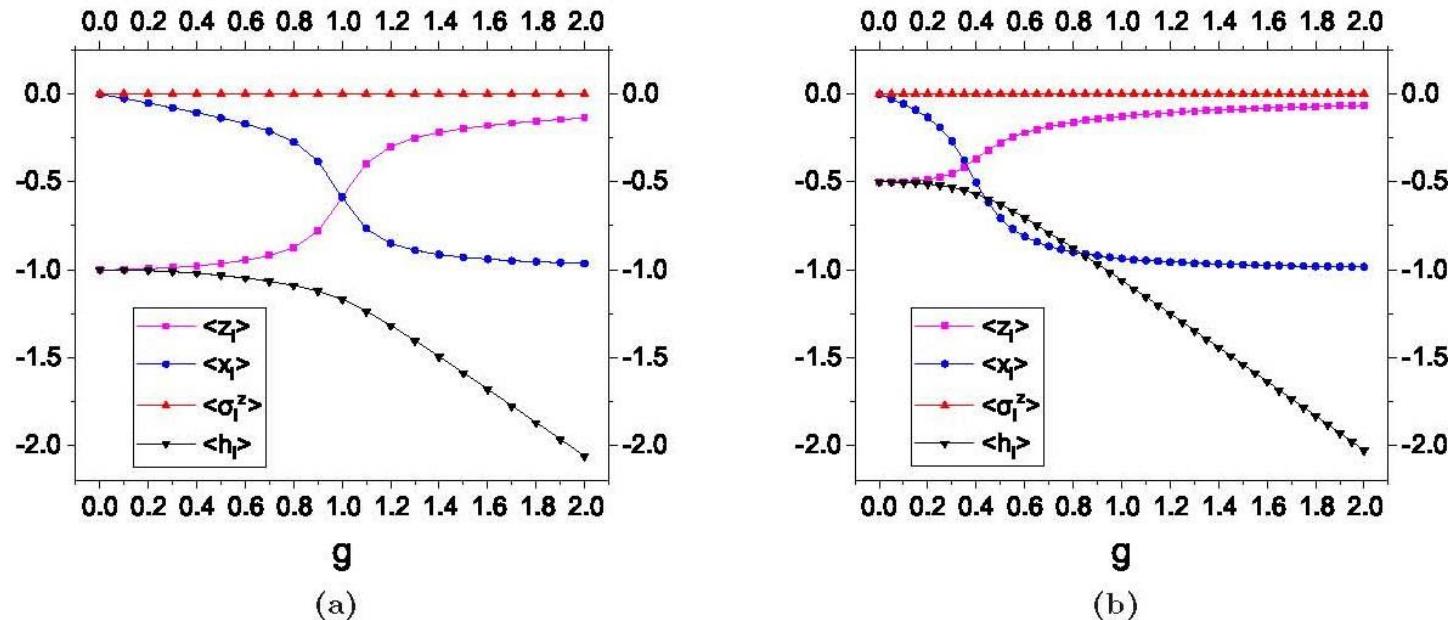


Figure 15.  $\langle \sigma_l^z \rangle$ ,  $\langle z_l \rangle$ ,  $\langle x_l \rangle$  and  $\langle h_l \rangle$  of one qubit  $l$ , as functions of  $g$ . (a)  $d=3$   $2 \times 2 \times 2$  lattice. (b)  $d=2$   $3 \times 3 \times 3$  lattice.

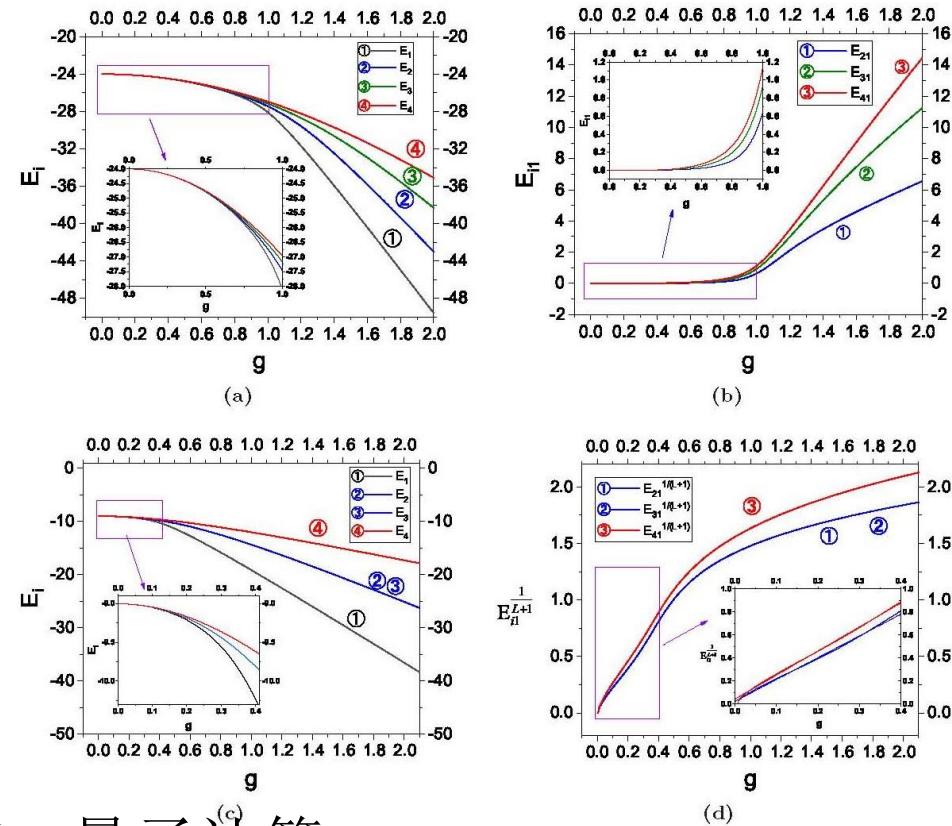
# Energy splitting between different topological sectors

For  $d=2$ , simulation result:

$$E_{i1} \propto g^{L+1}$$

$$= ge^{-L/\xi}, \quad \text{with } \xi \equiv -1/\ln g$$

Previous tensor networks found for fixed  $g$ , exponential decay with  $L$



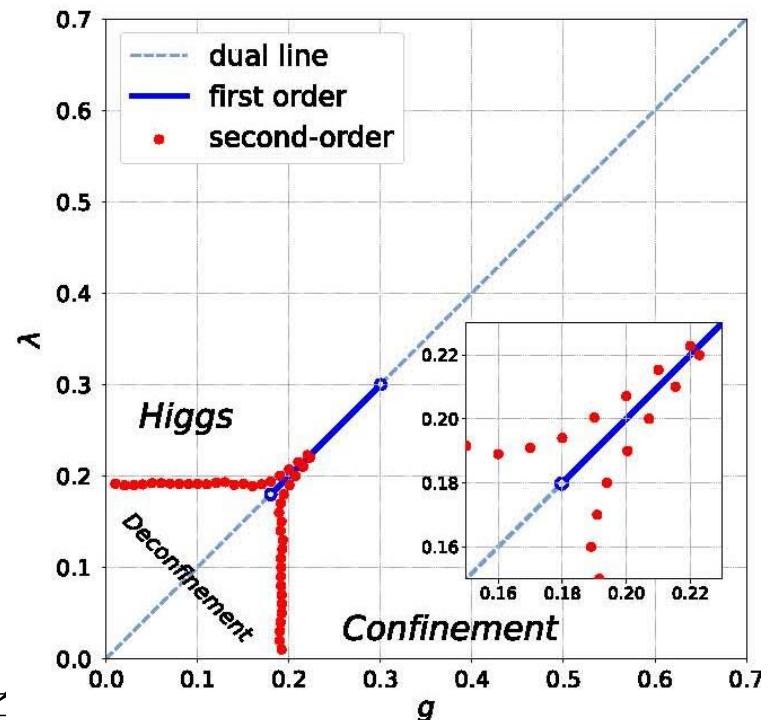
# 扩展：加物质场

PHYSICAL REVIEW D 105, 054508 (2022)

## Digital quantum simulation and pseudoquantum simulation of the $\mathbb{Z}_2$ gauge–Higgs model

Yiming Ding, Xiaopeng Cui<sup>✉</sup>, and Yu Shi<sup>✉</sup>\*

$$H = -J \sum_v \tau_v^x - h \sum_p B_p^z - g \sum_l \sigma_l^x - \lambda \sum_{\langle j,k \rangle} \tau_j^z \sigma_{\langle j,k \rangle}^z \tau_k^z$$



◎施郁：量子物理

# 小结

- 量子纠缠是量子力学的基本问题，近年带来很多前沿研究，包括量子计算和量子模拟。
- 量子计算和量子模拟是研究物理学中具有复杂的量子纠缠的系统的新途径。
- 用高性能计算机对量子模拟和量子计算进行经典模拟（赝量子模拟）是一个很有意义的工作。
- 重要例子：格点规范理论。
- 我们就 $Z_2$  规范理论做了一些工作。
- 我们的方法：用量子线路实现量子绝热算法，并进行GPU模拟。

- 取得一些结果。算法上，将Trotter分解推广到随时间绝热变化的哈密顿量；规范对称性自动保持。
- 完整演示了这个模型的量子模拟过程。
- 得到有用的物理结果，如量子相变在3d是一级，在2d是二级，以及拓扑性质；也是该模型在3d的第一个数值结果；得到有物质场耦合时的局部相图。
- 下一步：QCD。

**Thank you for your  
attention!**