

Kwantowe sieci tensorowe: Od szkieł spinowych do kwantowego transportu

W fizyce fazy skondensowanej pojawia się wiele skomplikowanych, silnie skorelowanych układów, które da się charakteryzować poprzez korelacje między ich elementami składowymi. Rozpoznanie struktury takich korelacji, oraz wynikającej z nich geometrii stanu może pozwolić na efektywne symulacje numeryczne i przez to szczegółowy opis jego właściwości. Tym niemniej, jest to bardzo trudny problem który wymaga wyrafinowanych metod numerycznych. *Kwantowych sieci tensorowe* stanowią rodzinę takich metod, które objawiły się w ostatnich latach jako jedno z wiodących i najbardziej precyzyjnych narzędzi do opisu kwantowych układów wielu ciał. Sukces sieci tensorowych wynika z możliwości skompresowania ogromnej ilości informacji potrzebnej do określenia stanu układu i zapisania jej jako kombinacji małych, prostych elementów. Aby zastosować maszynę sieci tensorowych, muszą być spełnione dwa warunki. Po pierwsze, opisywany stan musi pozwalać na taką redukcję. To czy jest to możliwe zależy od ilości splątania między różnymi elementami układu. Po drugie, trzeba móc wydobyć odpowiednią informację z sieci tensorowej – co nie zawsze okazuje się możliwe.

Głównym celem tego projektu jest rozszerzenie zastosowań sieci tensorowych w dwóch obszarach zagadnień. Jeden dotyczy szczegółowego opisu transportu elektronów lub cząstek w nanozłączach. Układy takie, o wielkości pojedynczych nanometrów, pojawiają się w szeregu kontekstów zarówno czysto naukowych, jak i z uwagi na ich liczne praktyczne zastosowania. Można tu na przykład wspomnieć o ultra-precyzyjnych czujnikach w nanoskali, nanoelektronice, lub kropkach kwantowych i ich zastosowaniu w komputerach kwantowych. Szczegółowy opis teoretyczny tej klasy problemów jest jednak niezwykle trudny, a szereg fundamentalnych pytań dotyczących wpływu różnych oddziaływań na zachowanie złącza pozostaje otwarta. Zrozumienie takie pozwala zaś w sposób oczywisty na lepsze projektowanie użytecznych urządzeń. Użycie sieci tensorowych do tej klasy zagadnień było ograniczone ze względu na dynamiczną, nierównowagą naturę tej klasy problemów. Prąd przepływający między oddzielnymi przestrzennie częściami systemu prowadzi do pojawienia się między nimi znacznego splątania, zabójczego dla możliwości zastosowania sieci tensorowych. Niedawno pokazaliśmy jednak, że istnieją reprezentacje tego problemu w których splątanie jest ograniczone. Istnienie takich reprezentacji pozwala przesunąć granice stosowalności sieci tensorowej aby wydajnie reprezentować układ złącza i adresować niesymulowane dotychczas problemy transportu. Toruje to drogę do odpowiedzi na niektóre ze wspomnianych powyżej podstawowych pytań oraz głębsze zrozumienia fizyki tych układów.

Drugi z celów projektu koncentruje się na klasycznych układach spinowych z nieporządkiem – tak zwanych szkiełach spinowych. O układzie takim można efektywnie myśleć jako o sieci strzałek. W zależności od charakteru oddziaływania sąsiednie strzałki mogą preferować ustawienie w tym samym lub w przeciwnych kierunkach. Frustracja powoduje że nie da się zadowolić wszystkich więzów jednocześnie, a znalezienie optymalnej konfiguracji dla dużej sieci staje się praktycznie niemożliwe. Jest to przykład tak zwanego problemu NP-trudnego. Powszechnie uważa się że nie może istnieć algorytm, który jednoznacznie i efektywnie jest w stanie rozwiązywać dowolny problem z tej klasy. Pomimo, że znalezienie najlepszej odpowiedzi typowo nie jest możliwe, w praktyce stosuje się wiele heurystycznych algorytmów które pozwalają znajdować rozwiązania nienajgorsze. Często używa się tutaj metod Monte Carlo, które mogą jednak grzeznąć w lokalnych minimach. W takim przypadku trzeba mieć możliwość znalezienia dużego klastra strzałek, obrócenie których pozwala na jakościowe polepszenie rozwiązania. Tego typu dyskretne problemy optymalizacyjne pojawiają się w wielu obszarach fizyki, ale także w uczeniu maszynowym i zastosowaniach inżynierskich. Dla zilustrowania ich znaczenia warto zauważyć, że głównym celem sławnego symulatora kwantowych rozwijanych przez firmę D-Wave jest właśnie rozwiązywanie takich problemów. Procesory D-Wave operują na niskowymiarowych sieciach, a w takim przypadku problem posiada też zwartą reprezentację jako sieć tensorowa. Wyciągnięcie istotnej informacji z takiej sieci stanowi jednak wyzwanie. Celem tego projektu jest rozwój metod opartych na sieci tensorowej, jako narzędzia do znajdowania wspomnianych wyżej klastrów. Pozwala to znajdować całe klasy wyraźnie różnych dobrych rozwiązań, opisując przy okazji ich geometrię. Zrozumienie dołączonych ograniczeń takiego podejścia może mieć istotne znaczenia dla przyszłych kierunków rozwoju procesorów kwantowego a jednocześnie dać nowe narzędzie do ulepszenia metod Monte Carlo.

Pierwsza część projektu wykorzystuje istnienie struktury w celu efektywnej symulacji zjawisk kwantowego transportu, zaś w drugiej części wykorzystujemy symulacje do znajdowania struktur. Cele te wzajemnie się uzupełniają i dobrze obrazują interdyscyplinarny charakter metod opartych na sieciach tensorowych.