

Simulation of two-dimensional strongly correlated systems via tree-like isometric tensor networks: from physical models to quantum computers

Bartosz Rzepkowski

Promotorzy

prof. dr hab. inż. Arkadiusz Wójs
dr Gunnar Möller

Streszczenie

Analiza dwuwymiarowych (2D) układów silnie skorelowanych stanowi niezwykle trudne wyzwanie ze względu na rosnącą wykładniczo ilość zasobów obliczeniowych wymaganych do ich dokładnej symulacji. W wybranych przypadkach problem ten może zostać rozwiązany dzięki zastosowaniu metod aproksymacyjnych, których sztandarowym przykładem są sieci tensorowe. W niniejszej pracy wykorzystujemy te metody w analizie układów silnie skorelowanych, kładąc szczególny nacisk na badanie własności monowarstwy CrI_3 oraz symulację obliczeń przeprowadzanych na komputerach kwantowych.

Stosujemy algorytmy wykorzystujące tzw. *Matrix Product States* (MPS) do analizy uporządkowania magnetycznego w hamiltonianie spin-3/2 XXZ na siatce plastra miodu, będącym efektywnym modelem monowarstwy CrI_3 . Pokazujemy, że fazy magnetyczne pojawiające się w układzie można przewidzieć z dużą precyzją za pomocą klasycznego przybliżenia modelu w szerokim zakresie przestrzeni parametrów. Zauważamy, że energia korelacji jest największa dla faz ferromagnetycznej i antyferromagnetycznej w płaszczyźnie materiału, podczas gdy jest ona równa zero w przypadku fazy ferromagnetycznej w osi prostopadłej do płaszczyzny.

Następnie przedstawiamy pojęcie *izometrycznych sieci tensorowych* (ang. *Isometric Tensor Networks*) (isoTNS) i omawiamy dwa algorytmy operujące na tej klasie struktur - *ruch Mojżesza* (ang. *Moses Move*) oraz dwuwymiarową wersję metody *Time Evolving Block Decimation* (TEBD²). W dalszej części pracy wprowadzamy dwie modyfikacje podstawowego formalizmu isoTNS oraz wspomnianych metod. Pierwsza z nich umożliwia przesunięcie całej tzw. przestrzeni ortogonalności do wnętrza układu, efektywnie pozwalając na zmniejszenie wymiarów tensorów wykorzystywanych w trakcie obliczeń. Ponadto, pokazujemy metodę reorganizacji przepływu entropii splątania przez system, efektywnie przekształcając go w strukturę drzewiastą. Prezentujemy także technikę aplikacji operatorów działających na węzłach znajdujących się na różnych gałęziach takiego układu. Porównujemy podstawowe i zmodyfikowane metody wykorzystujące isoTNS na zadaniu znalezienia stanu podstawowego modelu Isinga w zewnętrznym polu poprzecznym (ang. *transverse field Ising model*) poprzez ewolucję w czasie urojonym.

Na koniec pokazujemy, w jaki sposób zmodyfikowany algorytm TEBD² może być wykorzystany do emulacji wykonywania losowych obwodów kwantowych, z jednoczesnym oszacowaniem wierności dwu- oraz wielokubitowej. Otrzymane wyniki porównujemy z rezultatami uzyskanymi za pomocą istniejącej metody bazującej na MPS. Dla dwóch zademonstrowanych technik odnotowujemy bardzo wysoką średnią precyzję dwukubitową, w stosunku do liczby użytych parametrów, która jest odwrotnie proporcjonalna do ilości splątania występującego w układzie. Przeprowadzamy dogłębną analizę wąskiego gardła zmodyfikowanego algorytmu TEBD² oraz proponujemy alternatywne podejście potencjalnie pozwalające na jego obejście.