Kvantumadatkompresszió és kvantuminformáció klasszikus szuperszámítógépeken

Legeza Örs

Erősen korrelált rendszerek "Lendület" kutatócsoport

Wigner Fizikai Kutatóközpont, Budapest

Big Data Day, 2013.09.12, Budapest

Érintett témák, hogyan jelenik meg a BigData koncepció

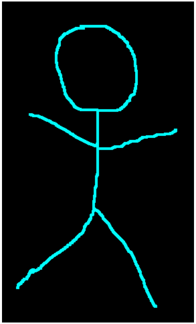
1. Mi a cél? Mi a kihívás?

2. Kölcsönható klasszikus és kvantum rendszer

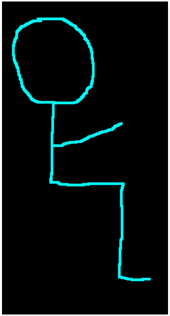
3. Kvantuminformáció szerepe:
   Algoritmusok polynomiális skálázódási tulajdonságokkal
   - Density matrix renormalization group (DMRG) White,1992
   - Matrix Product State (MPS) Ostlund,1995; Verstraete,2004
   - Tree Tensor Network States (TTNS) Murg,2010; Chan,2013

4. Szimulációk szuperszámítógépeken: A K-Computer

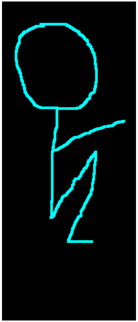
Objektum állapotai (bázis)



áll



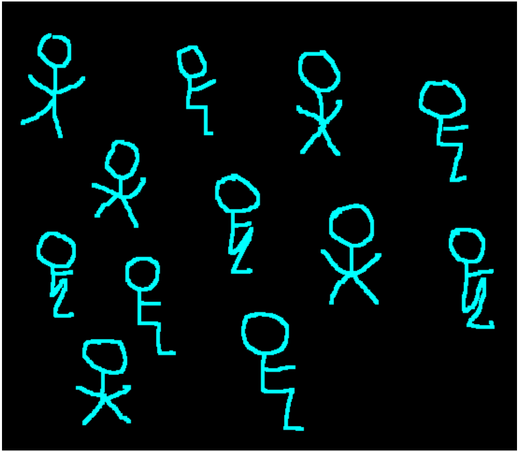
ül



guggol

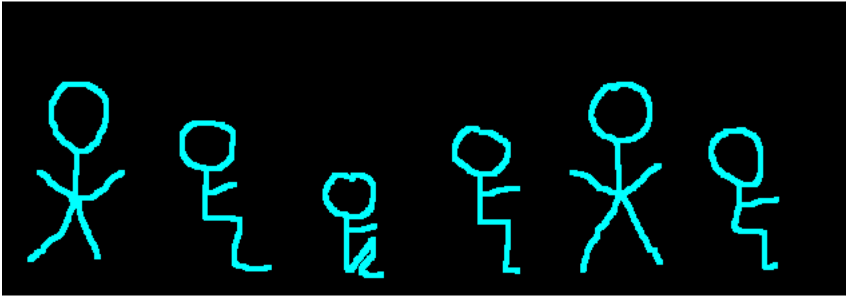
- Lokális tér dimenziója $d = 3$

Konfigurációs tér



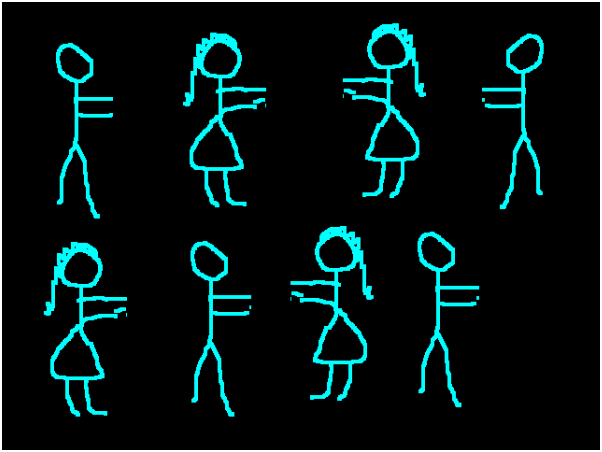
- Konfigurációs tér dimenziója: 3^N, ahol N az emberek száma
- Ez egy példa rendezetlen eloszlásra: véletlenszerűen vannak az egyének az egyes lokális állapotaikban
- Konfigurációs tér exponenciálisan skálázódik

Rendeződés kölcsönhatások/külső behatás révén



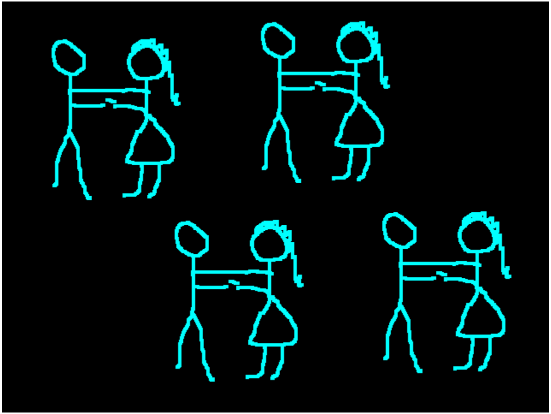
- Ez egy példa rendezett eloszlásra: egyének egyes lokális állapotai egyfajta rendet mutatnak
- Rendezettség mérhető korrelációkkal, rendparaméterekkel, stb
- A kölcsönhatásokat leíró operátort Hamilton-operátornak hívjuk

Táncterem: diszkó



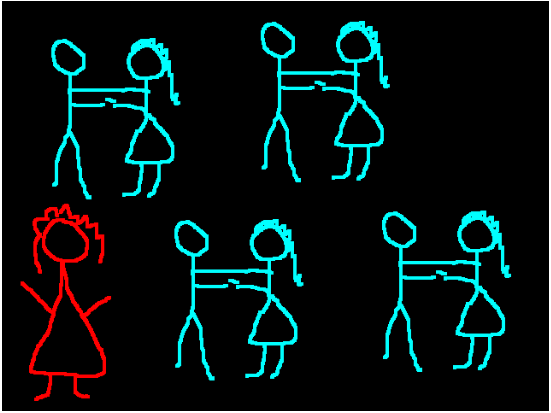
- Például diszkóban a táncosok szinte egymástól függetlenül táncolnak

Táncterem: társastánc



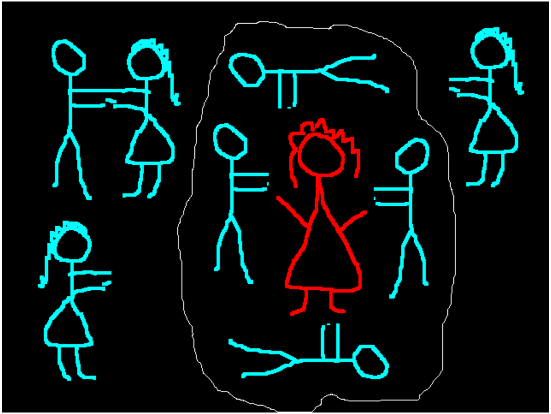
- Kötött párok alakulhatnak ki, egészen más tulajdonságokkal rendelkeznek
- Erős korreláció két egyén között
- Többi párral is lehetnek erős korrlációban: egyszerre lép minden páros: kollektív módusok

Táncterem: "Bomba nő" megjelenése



- Vonzó kölcsönhatás és perturbáció
- Párok felszakadhatnak
- Gerjesztett állapotok, amíg a rendszer nem relaxálódik

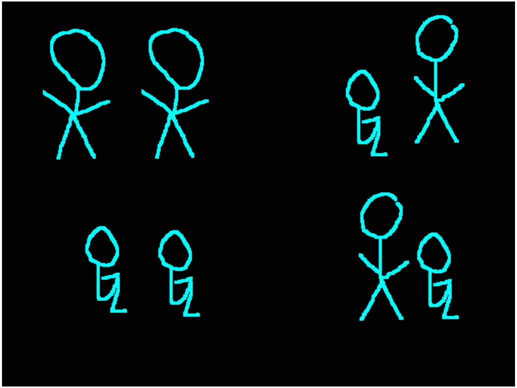
Táncterem: "Bomba nő" megjelenése



- Felszakadt párok
- "Bomba nő" körülötte az őt ostromló férfiakkal: mint egy megnövekedett tömegű részecske
- Például jóval lassabban tud haladni

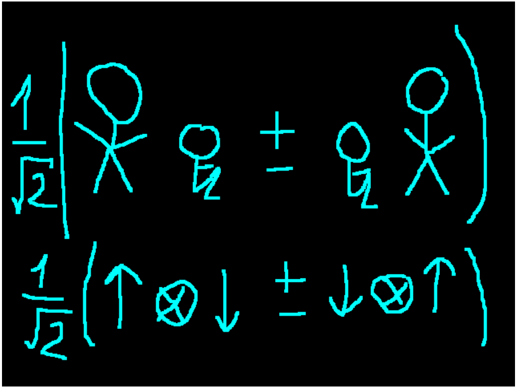
Klasszikus eset

- Például lokális tér d=2 dimenziós (két állapot van csak)
- Két egyén (A és B helyen)
- Négyféle konfiguráció lehet
- A helyen egyén vagy áll, vagy guggol
- B helyen egyén vagy áll, vagy guggol



Kvantumfizikában mindez:

- Például lokális tér d=2 dimenziós (két állapot van csak)
- Két egyén (A és B helyen)
- Négyféle konfiguráció lehet
- A helyen egyén 50%-os valószínűséggel vagy áll, vagy guggol
- B helyen egyén 50%-os valószínűséggel vagy áll, vagy guggol
- Összefonódott állapot → kvantuminformáció (q-dits)



Efficient simulation of quantum systems on classical computers?

- R. Feyman (1985): simulating quantum systems on classical computers takes an amount of time that scales exponentially with size of system, while quantum simulations can scale in polynomial time with system size.
- Tensor network states as low-rank aprroximations of high-dimensional tensor spaces $\rightarrow$ efficient simulations on classical computers with polynomial costs
- Major aim: no need to build expensive laboratories and experimental environments to design new materials and system just simulate them on computers
- In certain cases we can already reproduce and simulate experimental results

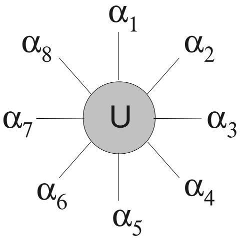
Major aim:

For example using a spin-orbit basis (d=4):

$$|\alpha_i\rangle \equiv |0\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle |\downarrow\uparrow\rangle$$

Wavefunction in full tensor form:

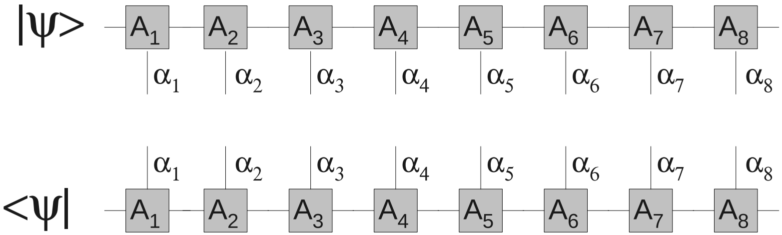
$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha_1,\cdots,\alpha_N} U_{\alpha_1,\cdots,\alpha_N} |\alpha_1,\cdots,\alpha_N\rangle$$



Tensor product approximations:

- Matrix Product State (MPS) representation:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_N}^{d} \mathrm{Tr}\left(\mathrm{A}^1_{\alpha_1}\mathrm{A}^2_{\alpha_2}\cdots\mathrm{A}^{\mathrm{N}}_{\alpha_{\mathrm{N}}}\right)|\alpha_1\rangle|\alpha_2\rangle\cdots|\alpha_{\mathrm{N}}\rangle$$



$$A_i[m,m]_{d_i}$$

- We can call this as a network.
- The Density Matrix Renormalization Group (DMRG) is a special algorithm that provides the optimized set of A_i matrices.

Tensor product approximation

Approximation of a single tensor, or even an ensemble of tensors $\mathbf{u}_y$, $y = 1, \ldots, m$, in tensor product spaces,

$$|\mathbf{u}_y\rangle = \sum_{x_1=1}^{n_1} \cdots \sum_{x_d=1}^{n_d} U(x_1, \ldots, x_d, y)\, |x_1\rangle \otimes \cdots \otimes |x_d\rangle \in \bigotimes_{i=1}^{d} V_i := \bigotimes_{i=1}^{d} \mathbf{C}^{n_i}$$

where $span\{|x_i\rangle : x_i = 1, \ldots, n - i\} = V_i = \mathbf{C}^{n_i}$. If there is no ambiguity with respect to the basis vectors $|x_i\rangle$, $x_i = 1, \ldots, n_i$, we can identify $\big(|\mathbf{u}_y\rangle\big)_{y=1}^{m}$, with the discrete function

$$\Big(\ (x_1, \ldots, x_d) \mapsto U(x_1, \ldots, x_d, y)\Big)$$

i.e. $x_i = 1, \ldots, n_i$, $y = 1, \ldots, m$.

DMRG, MPS, TT

A special representation of U if we introduce the matrices $\mathbf{U}_p(x_p) \in \mathbb{C}^{r_{p-1}\times r_p}$ by

$$\left(\mathbf{U}_p(x_p)\right)_{k_{p-1},k_p} = U_p(k_{p-1}, x_p, k_p)\ ,\ 1 < p < d\ .$$

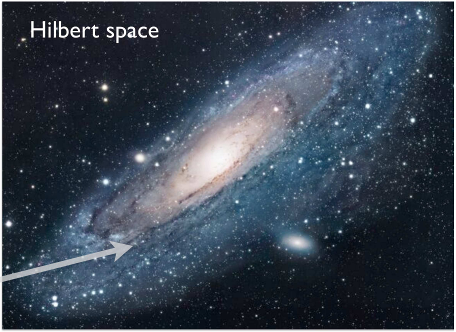
Then we can represent the tensor by matrix products

$$U(x_1, \ldots, x_d) = \mathbf{U}_1(x_1) \cdots \mathbf{U}_p(x_p) \cdots \mathbf{U}_d(x_d)\ .$$

Density matrix renormalization group (DMRG) method (White, 1992)
Matrix product state (MPS) (Östlund and Rommer, 1996; F. Verstraete and Cirac, 2004)
Tensor Train (TT) (Oseledets 2009; Hackbush 2009)

Sajátállapot megtalálásának komplexitása

- contains ground states of short-ranged Hamiltonians
- merit of TNS: parametrize this set efficiently!



ground states are here!

Kvantumos adattömörítés

1. $\rho^{(N)} = \rho \otimes \rho \otimes \ldots \otimes \rho$, ahol $\rho = \sum_\alpha p_\alpha |\phi_\alpha\rangle\langle\phi_\alpha|$, és a szöveg Neumann-entrópiája: $s(\rho^{(N)}) = Ns(\rho)$.
2. $\Lambda^{(N)}$ felbontható egy ún. tipikus ($\Lambda^{(N)}_{\text{typ}}$) és atipikus ($\Lambda^{(N)}_{\text{atyp}}$) altérre Π_{typ} és Π_{atyp} projektorok alkalmazásával.
3. Amennyiben bármely $\epsilon > 0$-ra, a sokaságnak szinte a teljes súlya benne van $\Lambda^{(N)}_{\text{typ}}$-ben, azaz $Tr\Pi_{\text{typ}}\rho^{(N)}\Pi_{\text{typ}} > 1 - \epsilon$, ugyanakkor az atipikus altérre $Tr\Pi_{\text{atyp}}\rho^{(N)}\Pi_{\text{atyp}} < \epsilon$, akkor bármilyen $\delta > 0$-ra és elég nagy N-re $\rho^{(N)}$-nek az ω_{typ} tipikus sajátértékhalmazához tartozó sajátértéke egy kicsiny tartományba esik:
$$e^{-N[s(\rho)+\delta]} < \omega_n < e^{-N[s(\rho)-\delta]} \,.$$
4. Ennek megfelelően a tipikus altér dimenziójára fennáll, hogy
$$(1-\epsilon)e^{N[s(\rho)-\delta]} \le \dim \Lambda^{(N)}_{\text{typ}} \le e^{N[s(\rho)+\delta]} \,.$$

Data sparse representation of the wavefunction

Example from 2002: DBSS approach applied on F_2 (d2h) (18/18)

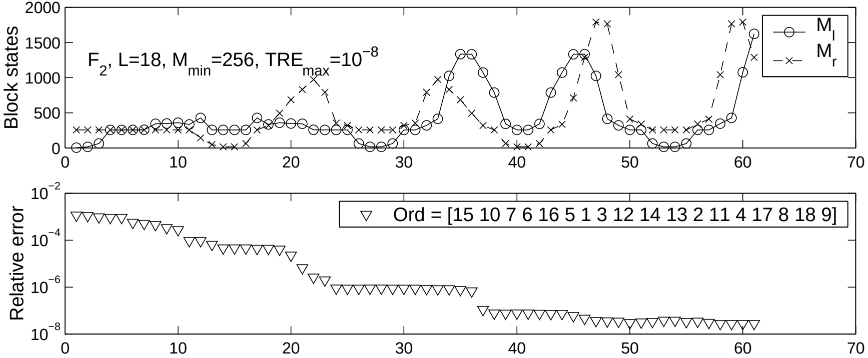
$\Lambda_{\mathrm{FCI}} = (2N)!/[(2N - N_e)!N_e!] = 9075135300$

$\Lambda_{\mathrm{DMRG}} = M_l \times 4 \times 4 \times M_r = 28800000$ ($M_l = 1200, Mr = 1500$)

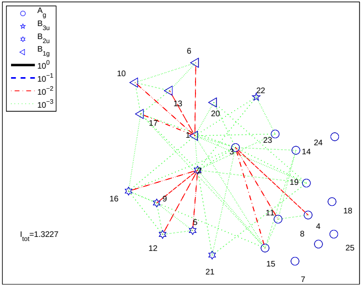
sparsity$\simeq$ 315

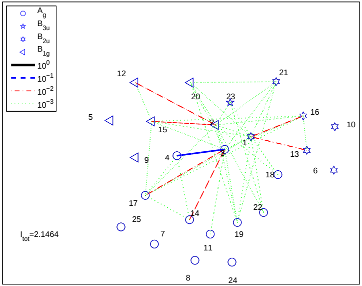
$\Lambda_{\mathrm{DMRG}} = M_l \times 4 \times 4 \times M_r = 7680$ ($M_l = 120, Mr = 4$)

sparsity$\simeq$ 1181658 Legeza, Roder, Hess, Phys Rev B (2002)



Entanglement → Multiply connected networks





LiF at r=3.05 LiF at r=13.7

Rissler, White, Noack, ECP (2006)

Murg, Verstraete, Schneider, Nagy, Legeza (2013)

- DMRG → Matrix product states, i.e. optimization along one-spatial dimension
- Need for an algorithm that reflects the entanglement topology of the problem → Tensor Network State (TNS) methods
- Use tensors $[A_i]^k_{\alpha_1 \ldots \alpha_z}$ where z is the coordination number

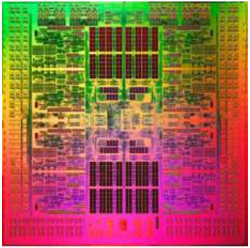
Fujitsu: K computer 10.51 petaflops

- DDMRG simulations: ACM Gordon Bell Prize in 2012
- Number of processors: 88,128
- Total Memory capacity: More than 1 petabyte

Fujitsu: K computer 10.51 petaflops

- The 6-dimensional mesh/torus topology in the K computer provides many communication routes between neighboring CPUs.
- Execution of data communications between CPUs via the shortest route and over the shortest period of time
- CPU: Fujitsu SPARC64 VIIIfx processors:
  2.2 gigaflops per watt
- Water cooling system for its major components

"6-dimensional mesh/torus" topology (model)



SPARC64™ VIIIfx

- A VKSZ12 BigData projekt – ha nem is ilyen volumenű fejlesztést céloz meg – mindenképpen egyedülálló lehetőséget biztosít, hogy a világban nagy intenzitással folyó kutatói és fejlesztői munkában a Magyarországról származó innovációs és szellemi tőke is érvényre juthasson.
- Mindez hosszabb távon hozzájárulna az utánpótlás neveléséhez, a kutatás és az ipar szorosabb összekapcsolódásához, illetve nemzetközi kutatási programok révén az ország európai integrációját is elősegítené.

Köszönöm megtisztelő figyelmüket!