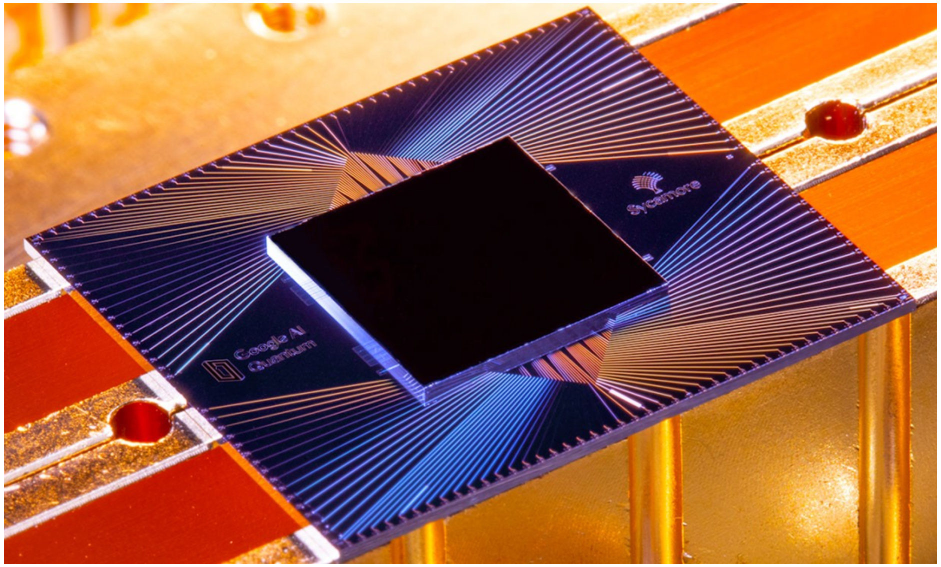
Теоретическая физика:
от спиновых стекол до алгоритмов оптимизации и квантовых процессоров

М.В.Фейгельман
Институт теоретической физики им.Л.Д.Ландау
Базовая кафедра “Проблемы теоретической физики”



Так выглядит первый квантовый процессор Google

О чем будет эта лекция

Чем отличается “несколько” от “очень много”

Ферромагнетики, антиферромагнетики и кристаллы

Стекла, кристаллы и жидкости

Спиновые стекла: магнитные сплавы и полигон для развития теории очень сложных систем

Ассоциативная память и алгоритмы оптимизации

Почему шум может способствовать поиску правильного решения

Простейший квантовый алгоритм: адиабатическое охлаждение

Теоретическая физика и структура науки

Что такое «фундаментальные проблемы» ? P. W. Anderson

«More is different», “*Science*”, 1972

http://www.sccs.swarthmore.edu/users/08/bblonder/phys120/docs/anderson.pdf

P.W.Anderson, “More is different”

according to the idea: The elementary entities of science X obey the laws of science Y.

X	Y
solid state or many-body physics	elementary particle physics
chemistry	many-body physics
molecular biology	chemistry
cell biology	molecular biology
•	•
•	•
•	•
psychology	physiology
social sciences	psychology

Что происходит при переходе от «несколько» к «очень много» ?

Есть 3 главные группы явлений:

Первая: хорошо исследованные «обычные» фазовые переходы

Вторая : системы с «памятью», т.е. нарушенной эргодичностью

Третья: системы с квантовым топологическим порядком

Сегодня мы поговорим лишь о первых двух

Общее свойство:

Нарушение симметрии ведёт к увеличению «степени упорядоченности» - т.е. к уменьшению ЭНТРОПИИ

При Т=0 энтропия = 0:

«теорема Нернста» или

3-й закон термодинамики

Магнитный порядок

- <u>Ферромагнетик</u>: $E = -J\, \Sigma_{(ij)}\, S_i\, S_j$

S_i - вектор «спина» (магнитного момента) в i-ом узле

J > 0: энергия связи минимальна для одинаковых S_i и S_j

При температурах $T < T_c$ $\langle S_i \rangle \neq 0$ -

<u>Нарушение симметрии !</u>

А какой именно?

1. S = +1 или -1 «модель Изинга» Z_2
2. $\boldsymbol{S} = (S_x, S_y)$ XY – модель O(2)
3. $\boldsymbol{S} = (S_x, S_y, S_z)$ магнетик Гейзенберга O(3)

Магнитный порядок -2

- <u>Антиферромагнетики</u> $E = -J\ \Sigma_{(ij)}\ S_i\ S_j$

  S_i - вектор «спина» (магнитного момента) в i-ом узле $J < 0$: энергия минимальна для конфигурации ↑↓↑↓

Определим $\boldsymbol{\sigma}_k = (-1)^k S_k$ и получим

$$E = -|J|\ \Sigma_{(ij)}\ \boldsymbol{\sigma}_i\ \boldsymbol{\sigma}_j \quad ???$$

<u>Да, но лишь для “*bipartite*” решеток</u>

АФМ на квадратной решетке

↑↓↑↓↑ **Изменение симметрии решетки:**

↓↑↓↑↓ удвоение периода

↑↓↑↓↑ **Кроме того, нарушение**

O(2) или O(3) вращений

АФМ на треугольной решетке ?

↑ ↓ **Неизвестно, где минимум E :**

? ***«фрустрация»***

В результате возникают «экзотические» фазы вещества, (стекла, спиновые жидкости…)

Кристаллическая решетка: нарушение симметрии по сдвигу

Остался ли «след» от этой «спонтанно нарушенной» симметрии ?

- Да! Появилась лишняя «мягкая мода» - поперечный звук. Так *всегда* бывает при спонтанном нарушении непрерывной симметрии

  («теорема Голдстоуна», ≈1965)

Стекла и тому подобное

Неэргодичность, «старение»,
модели систем памяти
методы оптимизации

Кристалл, стекло и жидкость

	Кристалл	Стекло	Жидкость
Твердое тело	да	да	нет
Есть поперечный звук	да	да	нет
Есть порядок расположения атомов	да	нет	нет

Стекла: порядок, скрытый в беспорядке

- «Спиновые стекла» - магнитные сплавы типа

$Cu_{1-x}Mn_x$ или $Au_{1-x}F_x$ $(x << 1)$ и другие

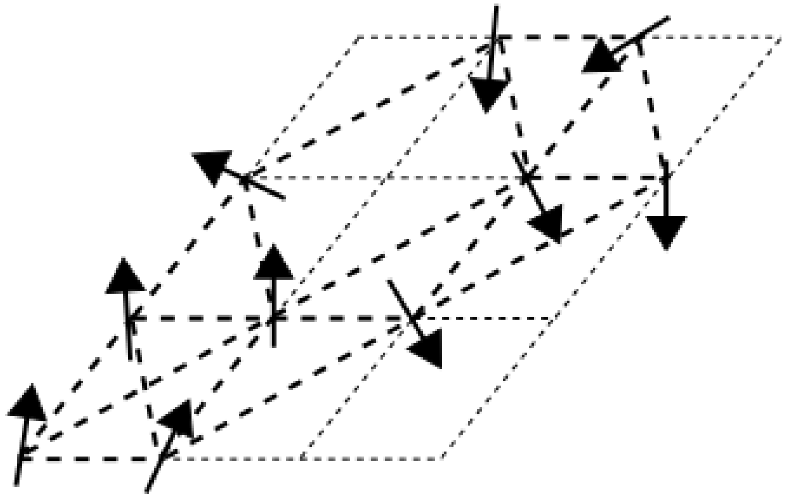
$$E = \Sigma_{(ij)} J_{ij} S_i S_j \qquad J(r) \sim \cos(r/a)/r^3$$

Знаки J_{ij} случайны !

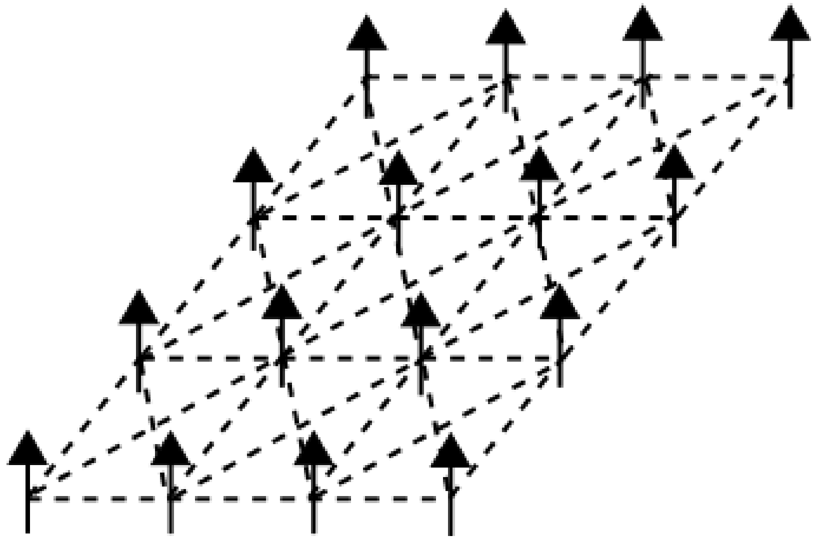
Другой пример - диполи:

$$V_{ij}^{ab} = (\delta_{ij}^{ab} - 3n_{ij}^{a} n_{ij}^{b})/r_{ij}^{3}$$

Какое состояние реализуется при низких темпер. ?



Спиновое стекло

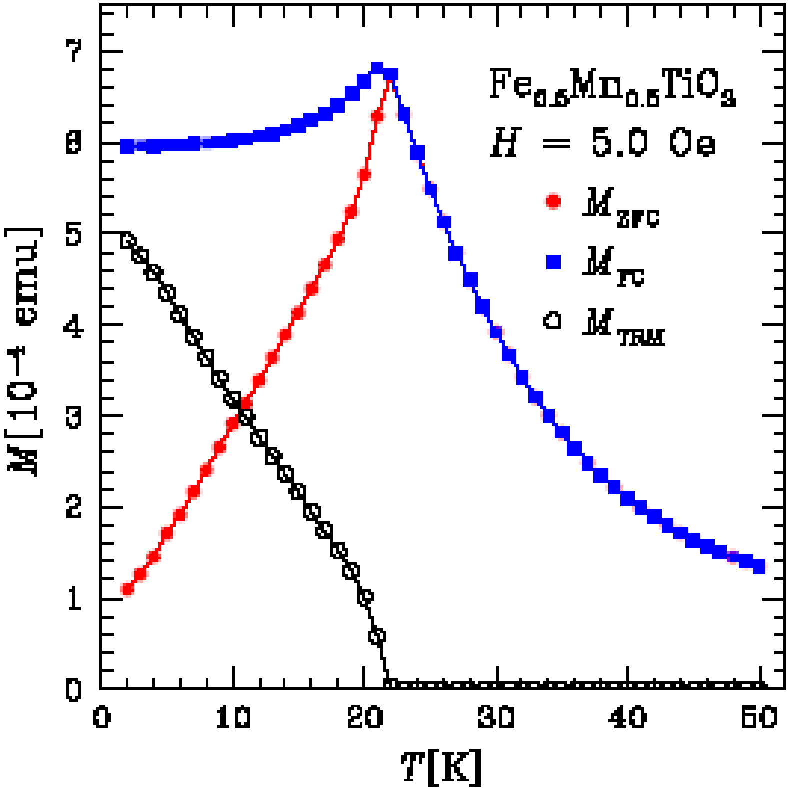


Ферромагнетик

Сколько существует
близких по энергии
Состояний ? Ответы
сильно отличаются для
FM и SG

Спиновое стекло: переход «замерзания»

первая теория – S.Edwards & P.W.Anderson 1975



$[\langle S_k \rangle] = 0$ - не ФМ

$[\langle \sigma_k \rangle]$ $= [(-1)^k \langle S_k \rangle] = 0$ – не АФМ

Однако локальные $\langle S_k \rangle \neq 0$

Состояние зависит от истории !!

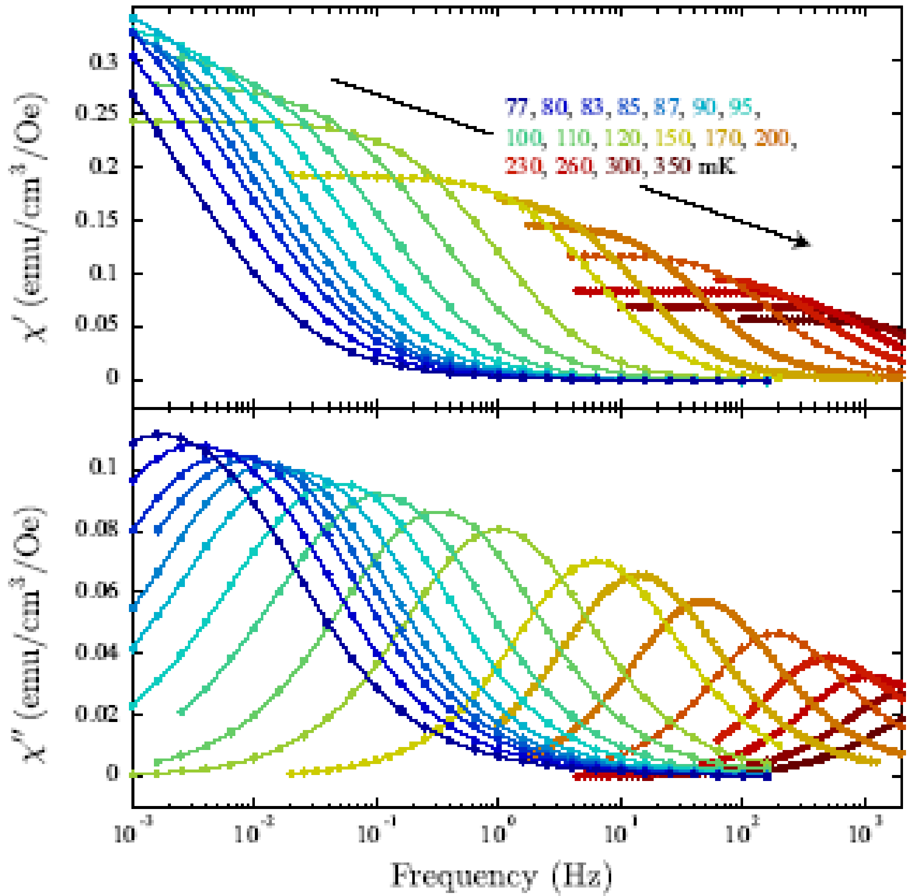


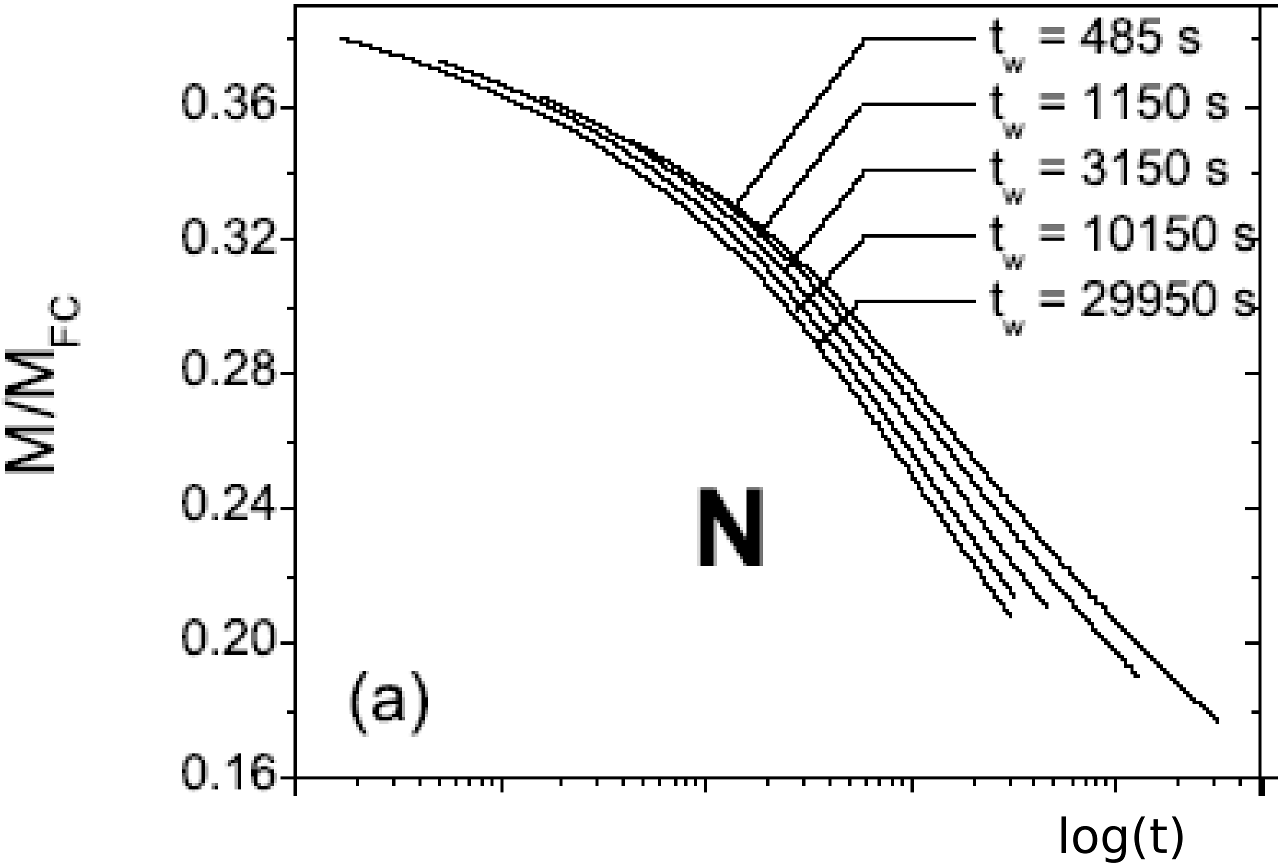
FIG. 1: AC susceptibility of the $x = 0.045$ sample showing in-phase $\chi'(f)$ and out-of-phase $\chi''(f)$ components. The spectra were obtained at temperatures 77, 80, 83, 85, 87, 90, 95, 100, 110, 120, 140, 150, 170, 200, 230, 260, 300 and 350 mK from left (blue) to right (red).

Спиновое стекло: *очень* медленная динамика

$LiHo_xY_{1-x}F_4$:

магнит.диполи

Спиновое стекло: «старение»



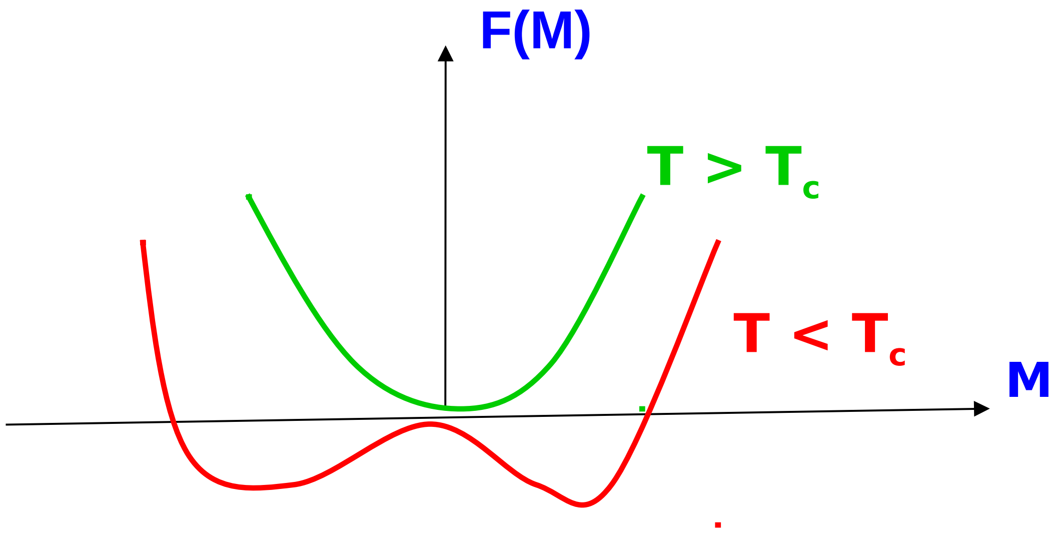
Это никогда не кончается !

Неэргодическое состояние вещества

Обычная статистическая физика не работает.
Необходимо обобщение.

Откуда такие странные для физических систем свойства ?

- «Обычная» система (напр. ферромагнетик) упорядочивается так:

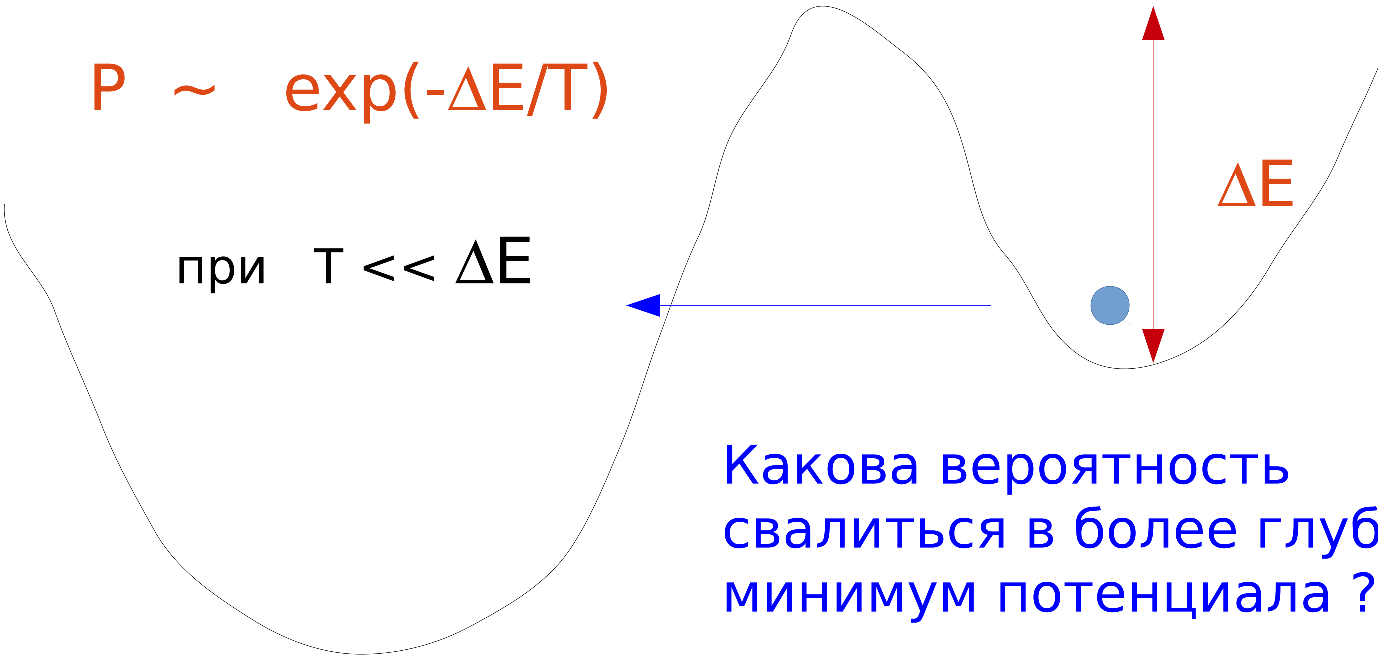


- Стекло: очень много минимумов энергии, не связанных между собой симметрией

Барьеры и времена

$P \sim \exp(-\Delta E/T)$

при $T << \Delta E$



Какова вероятность свалиться в более глубокий минимум потенциала ?

Поэтому широкое распределения величин ΔE приводит к ОЧЕНЬ широкому распределению скоростей переходов (времен релаксации)

Иерархия метастабильных состояний (G.Parisi, 1980)

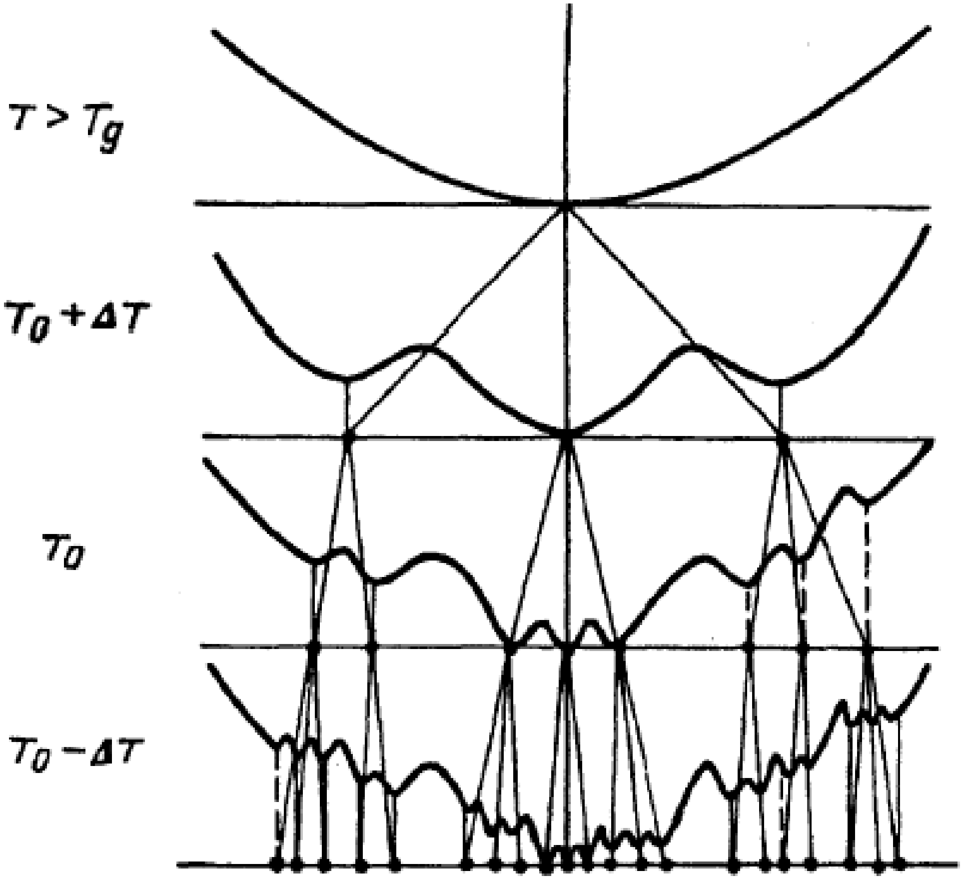


Рис. 4. Иерархическое дерево состояний спинового стекла

1. «Состояний» не только много, но число их растет с охлаждением

2. Они устроены как ветки дерева («ультраметричность»)

3. Энергетические барьеры между «ветками» растут с размером системы

Состояние теории ?

- Почти все, что надо, известно о свойствах модели спинового стекла где «каждый спин взаимодействует со всеми другими»
- Кое-что достигнуто (за 30 лет) по теории реальных спиновых стекол с близкодействием:

$$J(r) \sim \cos(r/a)/r^3$$

или еще быстрее убывает

- Имеющаяся теория спиновых стекол не очень подходит для исходной физической задачи, но крайне полезна для решения совсем других проблем:

Спиновые стекла, ассоциативная память и алгоритмы оптимизации

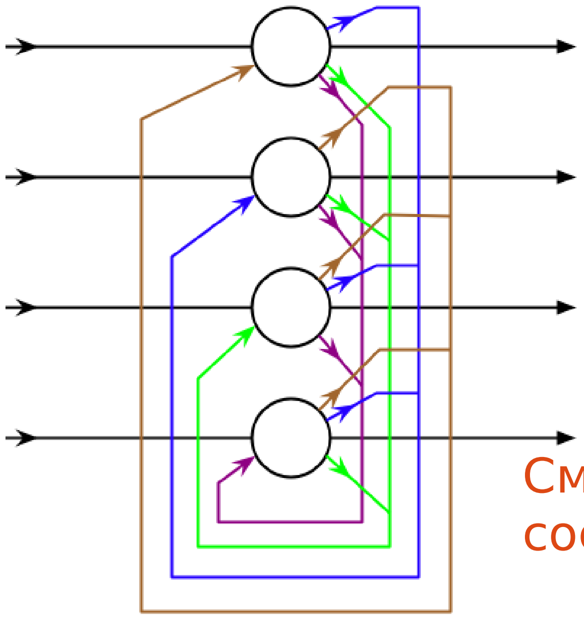
Что общего между системой памяти и стеклом ?

- «распределенная» или «ассоциативная» память:

  а) записано много картинок по «голографическому» принципу,

  б) обращение к ним идет по степени близости
- Стекло: «записано» очень много картинок, но нет способа их вспомнить (склероз…)
- Надо построить физический аналог, допускающий контролируемую запись картинок и их воспоминание «по заказу»

Deep learning, Neural Networks, etc....



Сеть Хопфилда для ассоциативной памяти

i=1...N

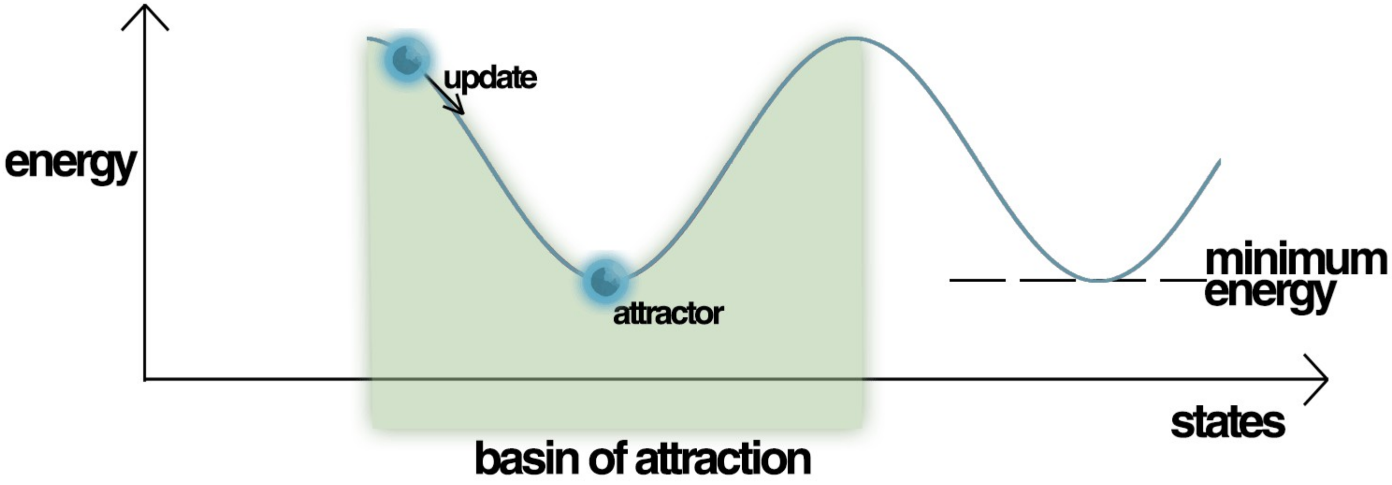
$$E = -\frac{1}{2}\sum_{i,j} w_{ij} s_i s_j + \sum_i \theta_i s_i$$

Смысл этой «энергии»: устойчивые состояния сети - минимумы энергии

$$w_{ij} = \frac{1}{n}\sum_{\mu=1}^{n} \epsilon_i^{\mu} \epsilon_j^{\mu}$$

Устойчивые “картинки”

$s_i = \varepsilon_i$



$n/N < 0.14$ чтобы схема работала как память

Иначе все перепутается- “стекло”

Статистическая физика и проблемы оптимизации

S. Kirkpatrick and C. D. Gelatt and M. P. Vecchi, Optimization by Simulated Annealing, *Science*, Vol 220, Number 4598, pages 671-680, 1983. **http://www.cs.virginia.edu/cs432/documents/sa-1983.pdf**

Главная идея: чтобы найти минимум «энергии» , удобно моделировать систему при какой-то «температуре» T и медленно ее понижать

Оптимизация: взгляд со стороны статистической физики

Решить задачу оптимизации – это найти минимум какого-то сложного функционала. Например, “задача коммивояжера”- провести кратчайший (или быстрейший) путь через множество случайно разбросанных точек, которые надо объехать.

Статфизическое решение: 1. запишем функционал $E\{S_i\}$

2. Построим динамический процесс с шумом, самое устойчивое состояние которого соответствует минимуму $E\{S_i\}$

3. Локальных минимумов очень много если задача нетривиальна. Поэтому простейший “наискорейший спуск” приводит обычно в состояние далекое от нужного (минимум локальный, но не глобальный)

4. Смоделируем динамику с “тепловым шумом” и будем медленно понижать “температуру”.

Simulated Annealing

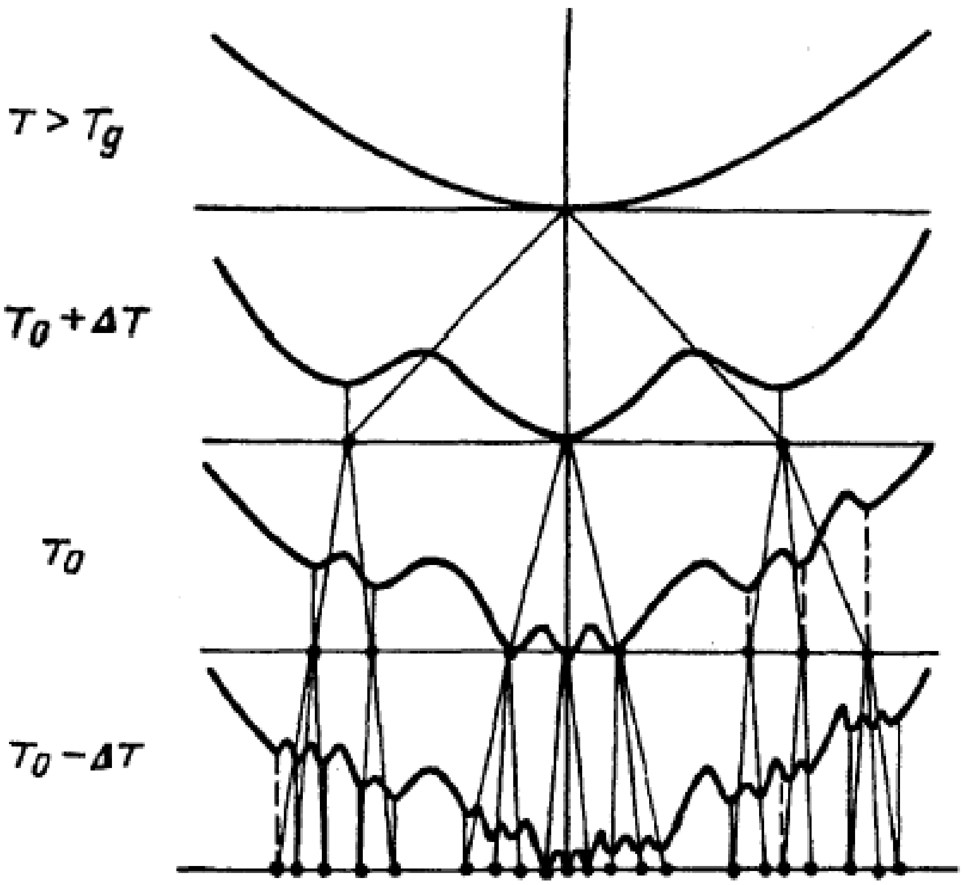


Рис. 4. Иерархическое дерево состояний спинового стекла

постепенно понижая температуру, мы быстрее найдем правильное состояния глубокого минимума «энергии»

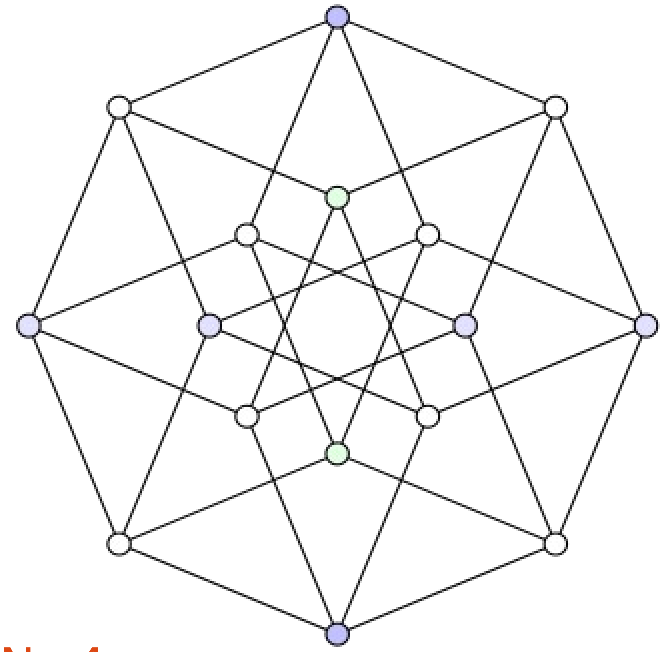
Простой аналог: быстрая охлаждение жидкости часто приводит к стеклу, а медленное – к кристаллизации

Идея квантового вычисления

Система из N “битов” может находиться в любой момент в одном из 2^N состояний.

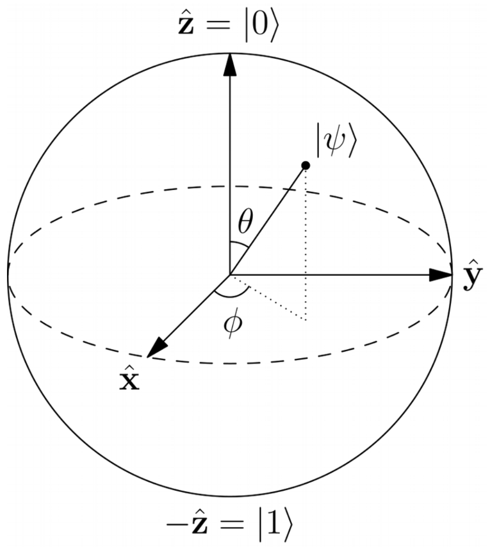
Представим их как вершины гиперкуба размерности N

Бит= (0,1)



Здесь N=4

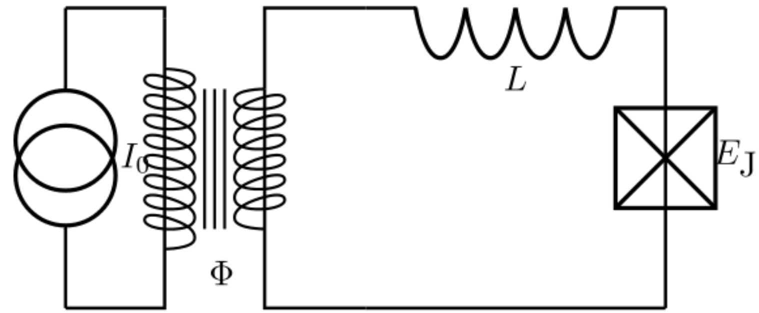
Система из N ку-битов может находиться в любой линейной суперпозиции узлов гиперкуба – как волна

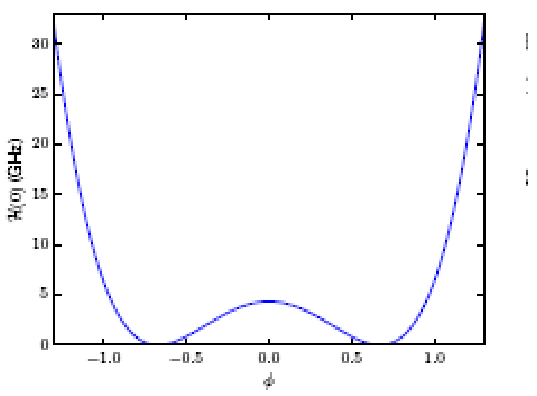


Каждый кубит- целая сфера вместо (0,1)

Из чего сделать кубит ?

1. Спин электрона в твердом теле
2. Спин ядра
3. Атом в ловушке
4. Ион в ловушке
5. Сверхпроводниковая схема микронных размеров

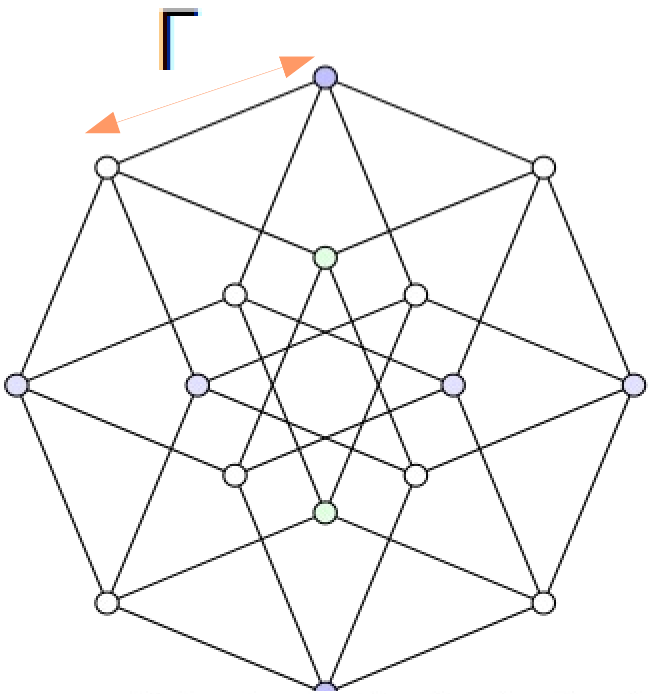




Главные достижения – именно здесь

Самый простой квантовый алгоритм:

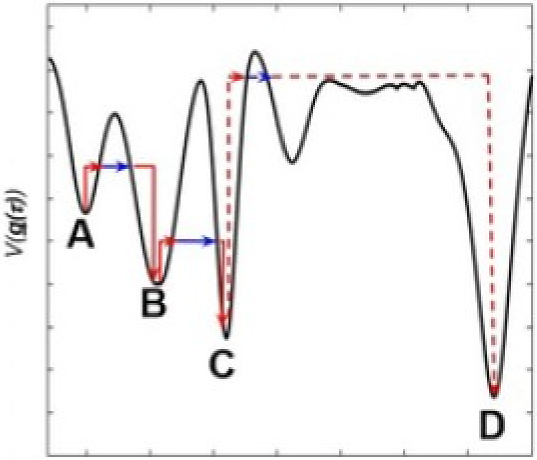
Quantum annealing



квантовый аналог “теплового отжига” в классической оптимизации

$$\hat{H}(t) = E(\hat{\sigma}_i^z) - \Gamma(t) \sum_{i=1}^{N} \hat{\sigma}_i^x$$

$i \; \partial\Psi/\partial t = H\,\Psi$



1. Надо найти минимум $E(\hat{\sigma}_i^z)$

2. Легко найти состояние при очень большом Γ

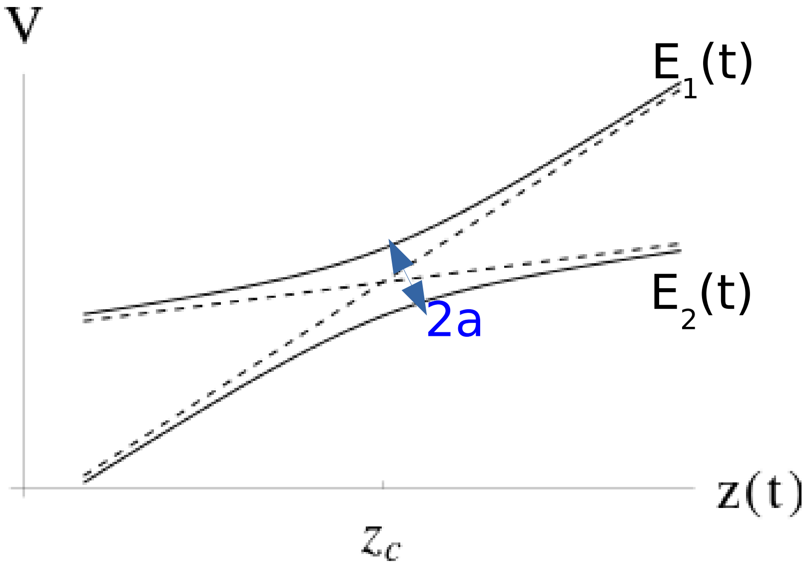
3. Начнем с большой Γ и будем его медленно уменьшать

“Адиабатическая теорема” - основное состояние перейдет в основное же, теперь для нового H

Сколь медленно надо менять Γ чтобы не нарушить условия адиабатической теоремы ?

Формула Ландау-Зинера (1932)
Квантовая теория молекулярных столкновений

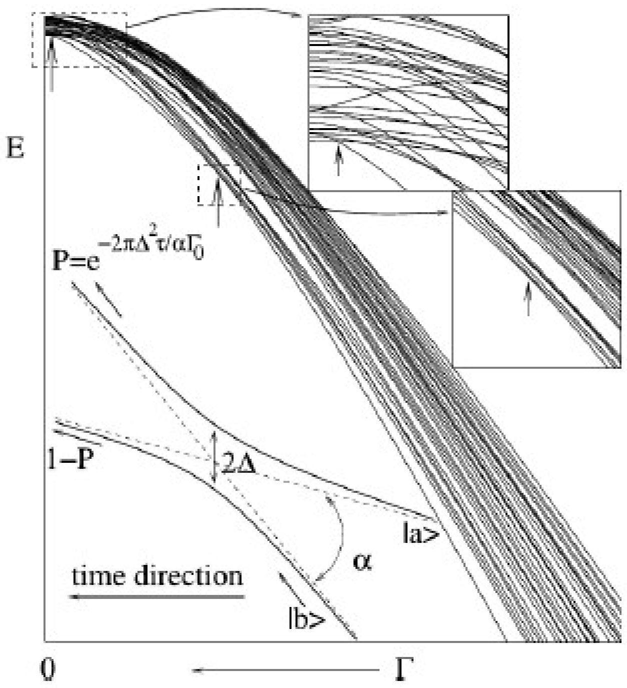
$$P_{ext} = \exp(-2\pi W) \qquad W = a^2/h\alpha$$



$$\alpha = d[E_1(t) - E_2(t)]/dt$$

Требуется большое W т.е. малое α

Вот как это выглядит для большой системы с N >> 1



Конец лекции

Продолжение здесь: http://chair.itp.ac.ru

Что будет, если фрустрация есть, а беспорядка нет ?

- «Обычное» стекло – как охлажденная жидкость превращается в твердое тело ?

  $\eta \sim \exp(T_0/(T-T_c))$ *“Vogel-Fulcher law”*

- «Геометрическая» фрустрация в сложных магнетиках:

  Как разделить северный и южный полюса магнита ?

Магнитный монополь, «вмороженный» в спиновый лёд

- Монополь Дирака: $\mathbf{B} = g\mathbf{n}/r^2$ $(\mathbf{n}=\mathbf{r}/r)$

  $g = m\,h/e$ - магнитный заряд (m- целое)

  как элементарная частица не обнаружен

- Монополь как возбуждение в сложном магнетике

  $\mathrm{div}\, B = 0$ но $\mathrm{div}\, H = 4\,\pi\, q_M$

Теория:

C. Castelnovo[1], R. Moessner[1,2], and S. L. Sondhi[3]

Nature **451**, 42 (2008)

Эксперимент:

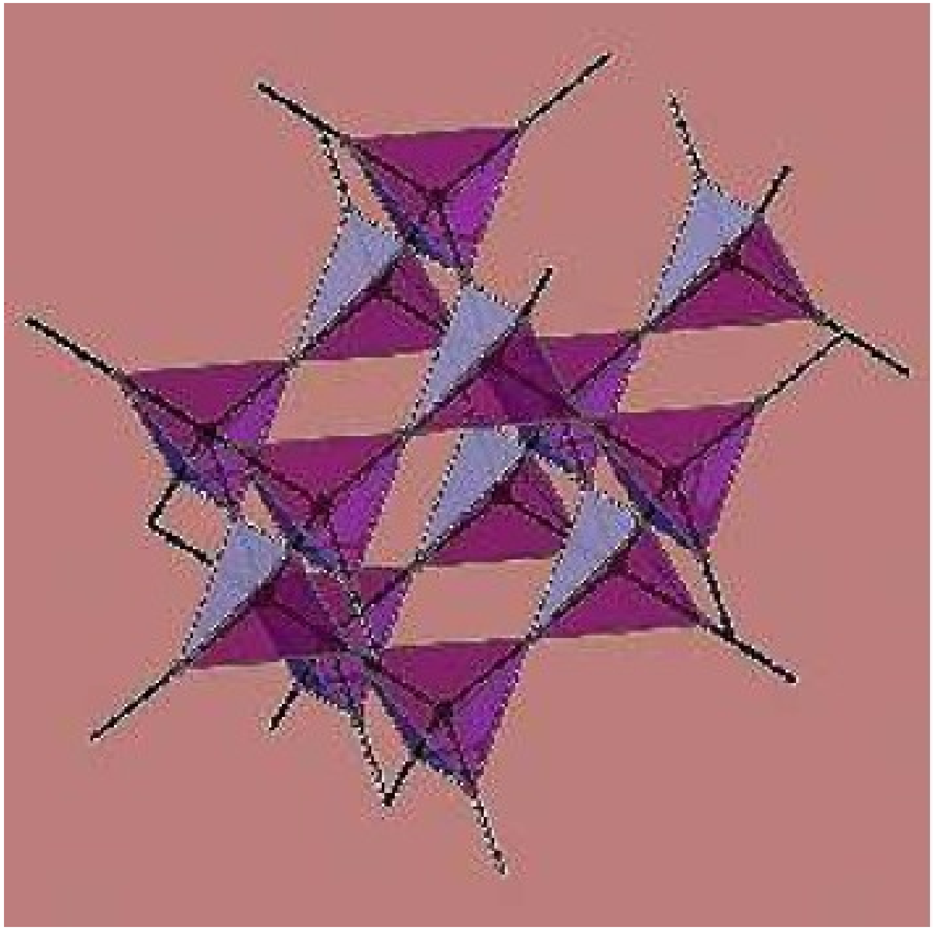
"**Magnetic charge transport**"

S.T.Bramwell et al arxiv: 0907.0956

Решетка типа «пирохлор»

- Магнетики типа “spin ice”:

$Dy_2Ti_2O_7$ $Ho_2Ti_2O_7$



“ice rule”:
в каждый тетраэдр
2 стрелки входят и
2 стрелки выходят