

Inteligencia Artificial para aprender Hamiltonianos cuánticos

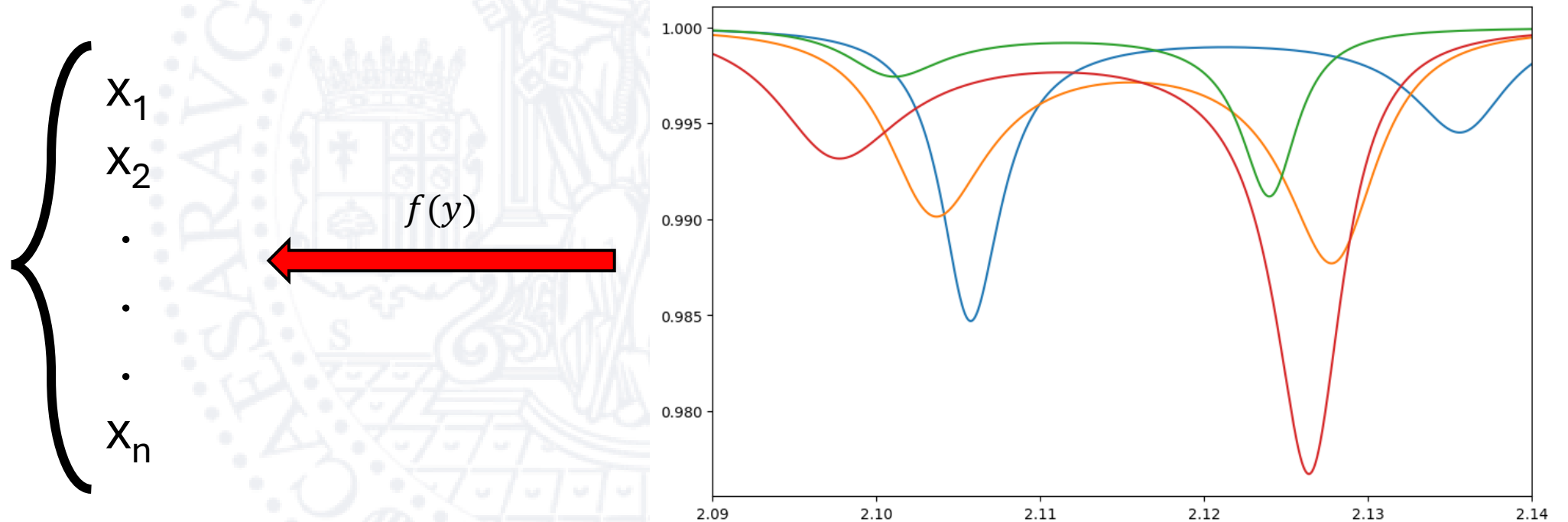
Samuel Blasco Osés

Director: David Zueco Láinez

Departamento de Física de la Materia Condensada
Facultad de Ciencias, Universidad de Zaragoza

Objetivo

- Obtener parámetros desde curvas



Problemas

Laboratorio

- Presupuesto
- Tiempo



Ordenadores

- Complejidad computacional



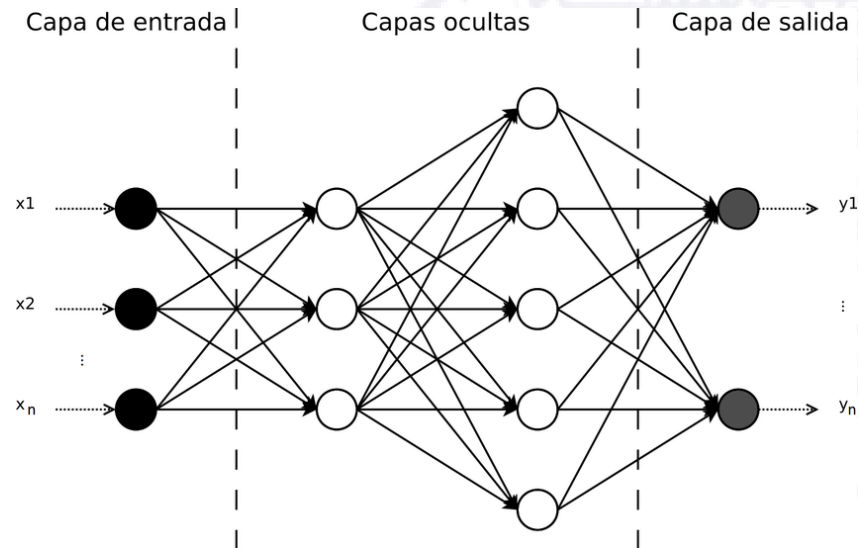
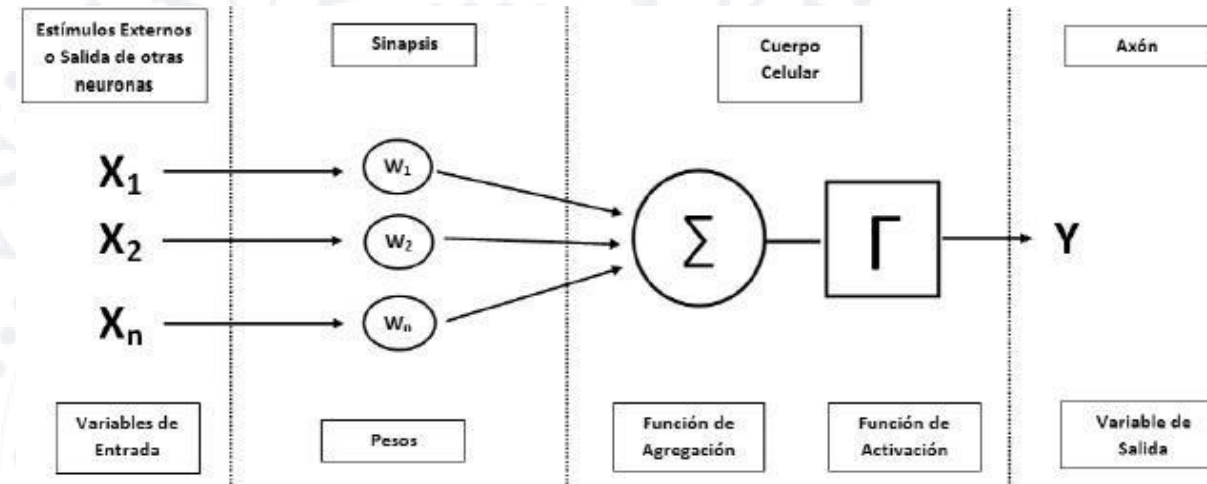
Solución: Inteligencia artificial (Redes neuronales)

- Datos sintéticos
- Aprendizaje supervisado
 - Datos conocidos
 - Se ajusta respecto al valor real



Redes neuronales. ¿Qué son y cómo funcionan?

■ Neurona

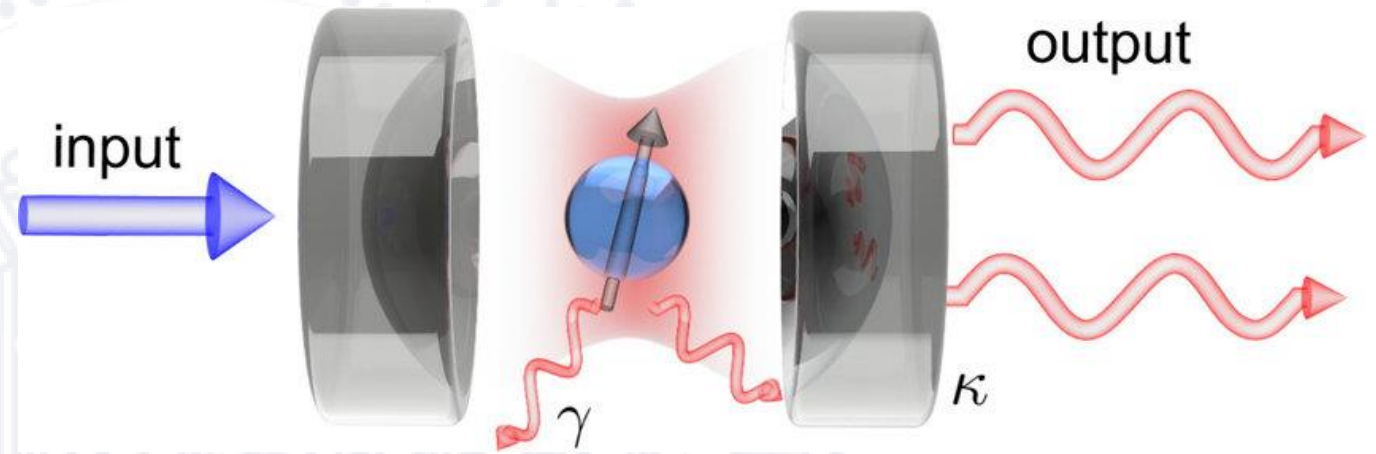


■ Redes neuronales densas:

- Pérdidas
- Backpropagation

Sistema a estudiar. Teoría

- Cavity resonante
- Átomo
- Interacción campo - átomo



$$H_{Rabi} = \hbar\Omega a^\dagger a + \frac{1}{2} \hbar\Delta E \sigma^z + \hbar g \sigma^x (a^\dagger + a)$$



Aprox. RWA

$$H_{JC} = \hbar\Omega a^\dagger a + \frac{1}{2} \hbar\Delta E \sigma^z + \hbar g (\sigma^+ a + \sigma^- a^\dagger)$$

Sistema a estudiar. Consideraciones experimentales

1. Cambios teóricos

- Sistema de spines
- Tasas de decaimiento (pérdidas)
- Guiado del campo EM $\longrightarrow H_{\text{guiado}} \approx \hbar \alpha \kappa (a e^{i\omega t} + a^\dagger e^{i\omega t})$

2. Representación de Schrödinger (e. o. m)

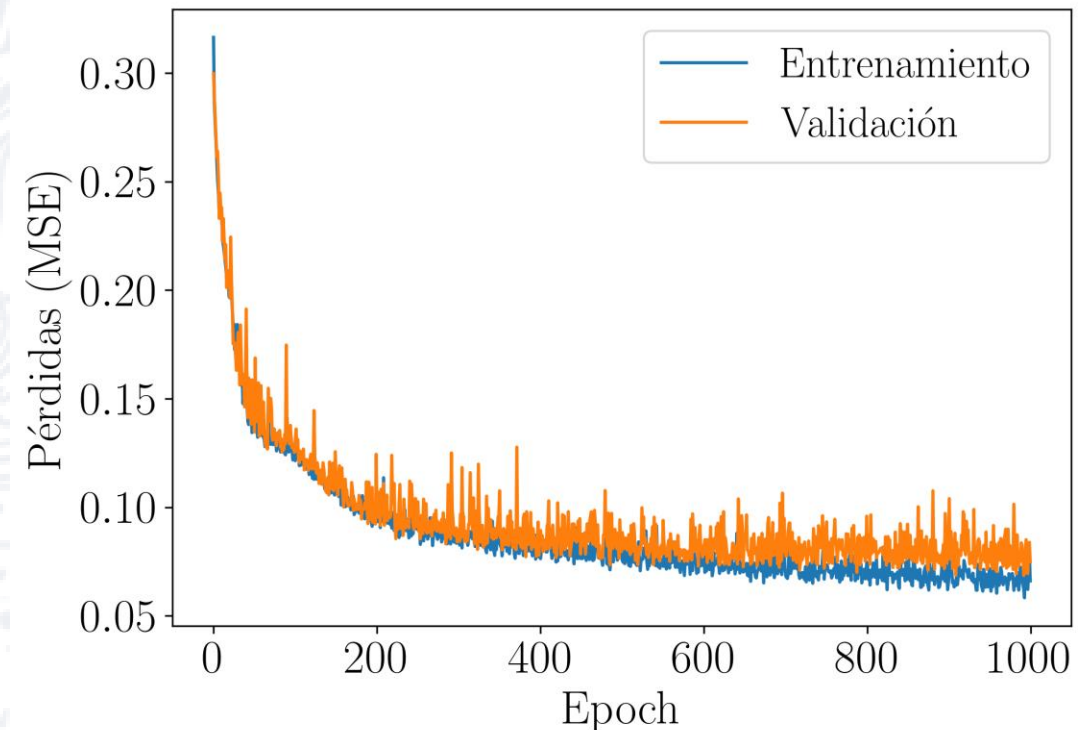
$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{A}, H] \rangle$$

3. Input-output

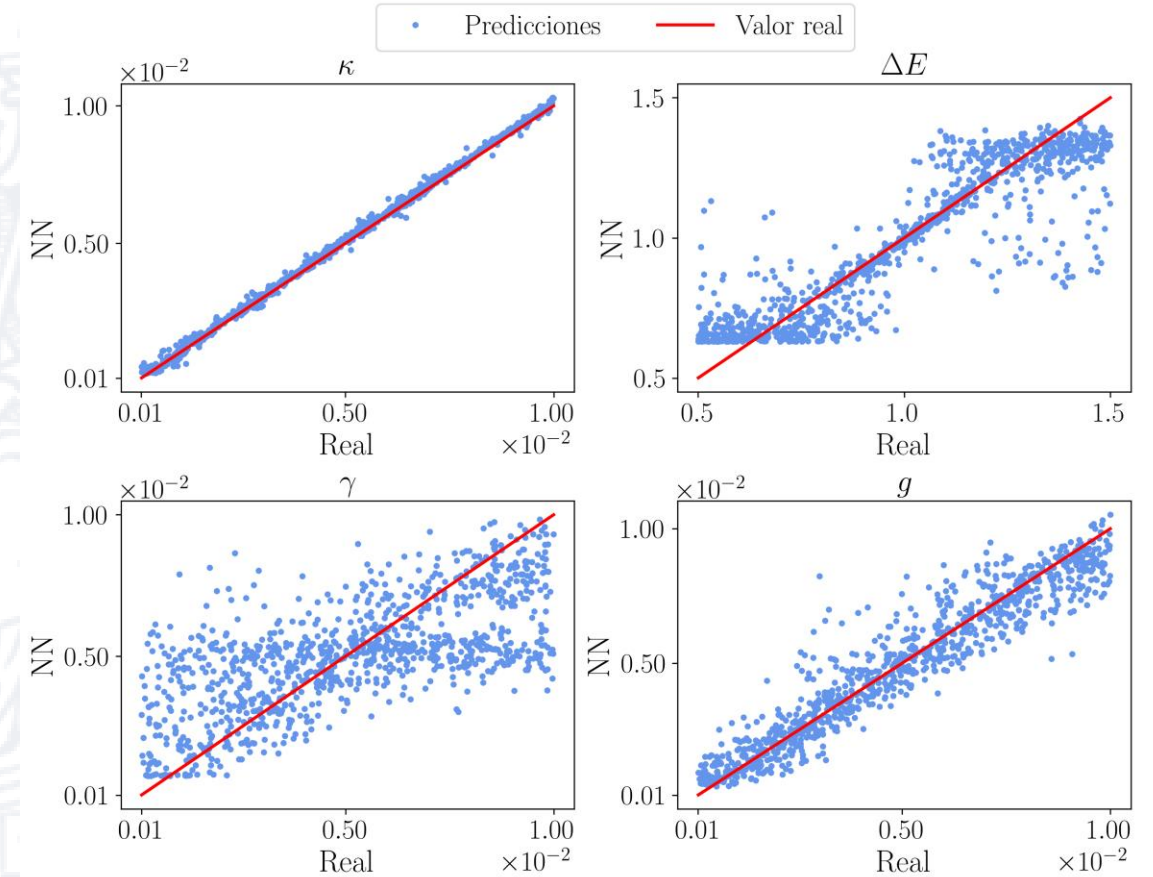
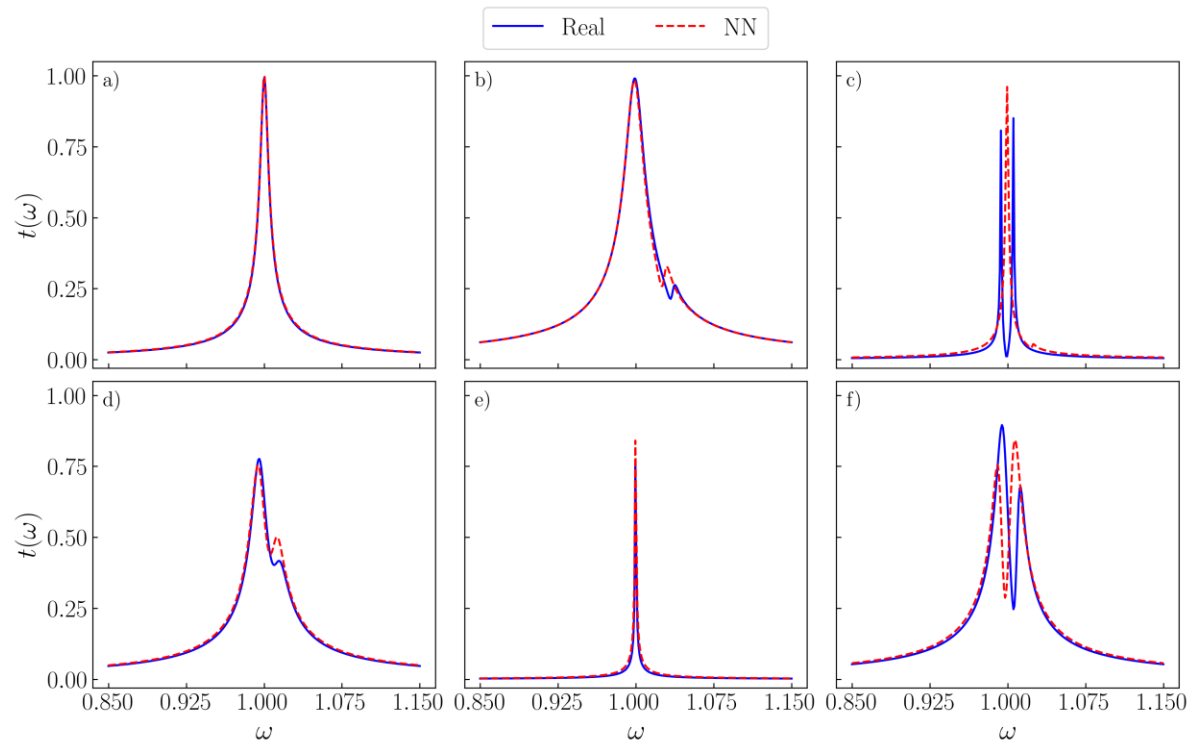
$$t(\omega) = -\frac{\langle a \rangle}{\alpha} \longrightarrow \boxed{t(\omega) = \frac{-\kappa}{(\Omega - \omega) - i\kappa - i \frac{g^2}{i(\Delta E - \omega) + \gamma}}$$

Nuestro modelo. Estudio previo

- Datos sintéticos. Generamos $\kappa, \gamma, g \in [10^{-4}, 10^{-2}]$, $\Delta E \in [0.5, 1.5]$,
 $\Omega = 1$ (fijo), 300 cortes $\omega \in [0.85, 1.15]$
- Estudio de hiperparámetros:
 - Tamaño y partición dataset
 - Número de capas y neuronas
 - *Batch size* y épocas
- Verificar overfitting

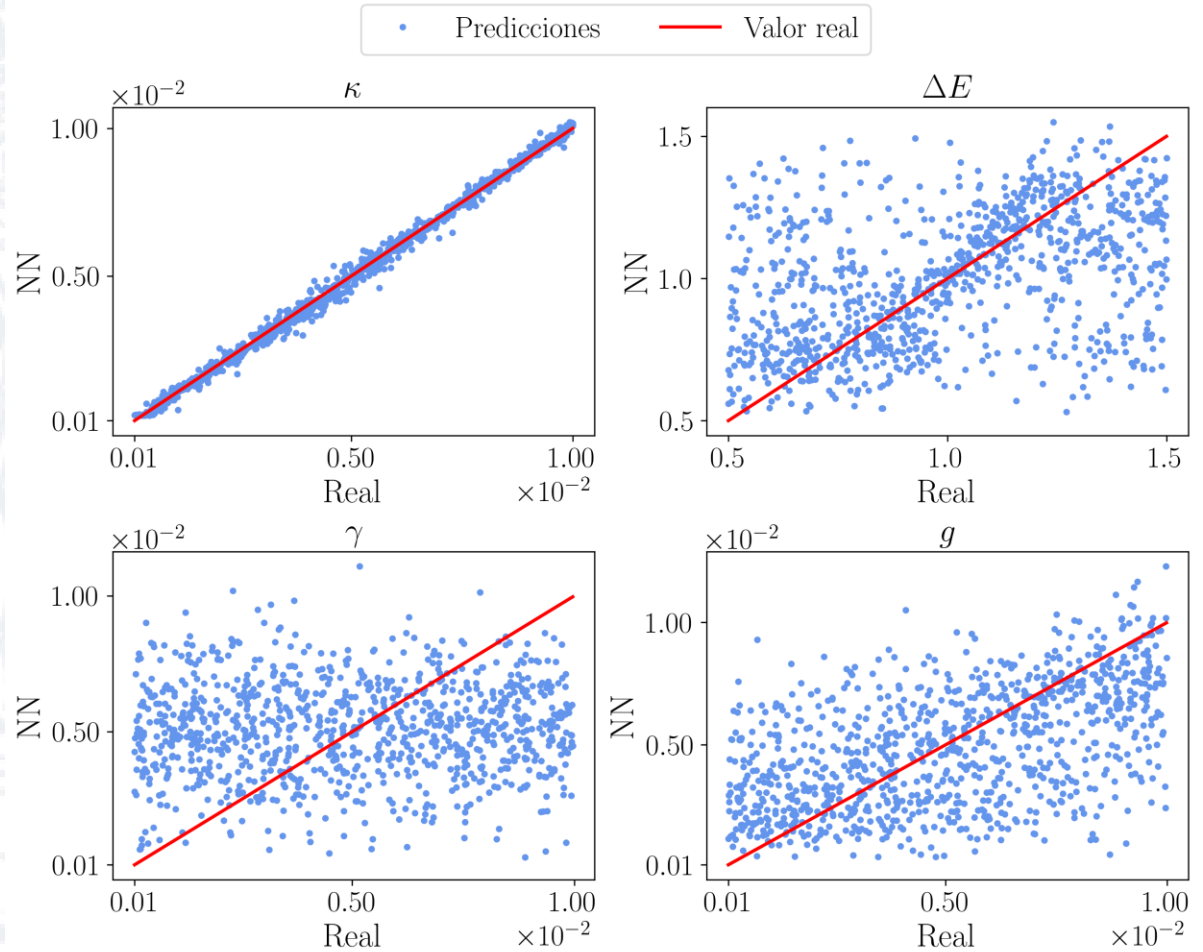
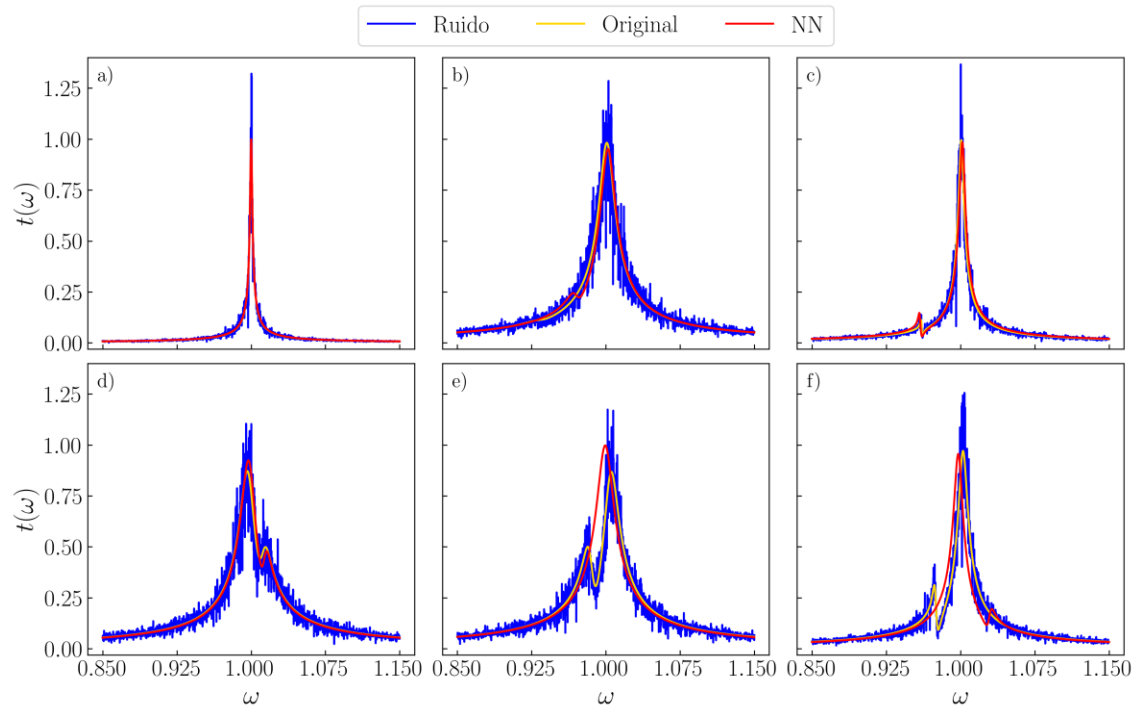


Nuestro modelo. Entrenamiento sin ruido



Nuestro modelo. Adición de ruido

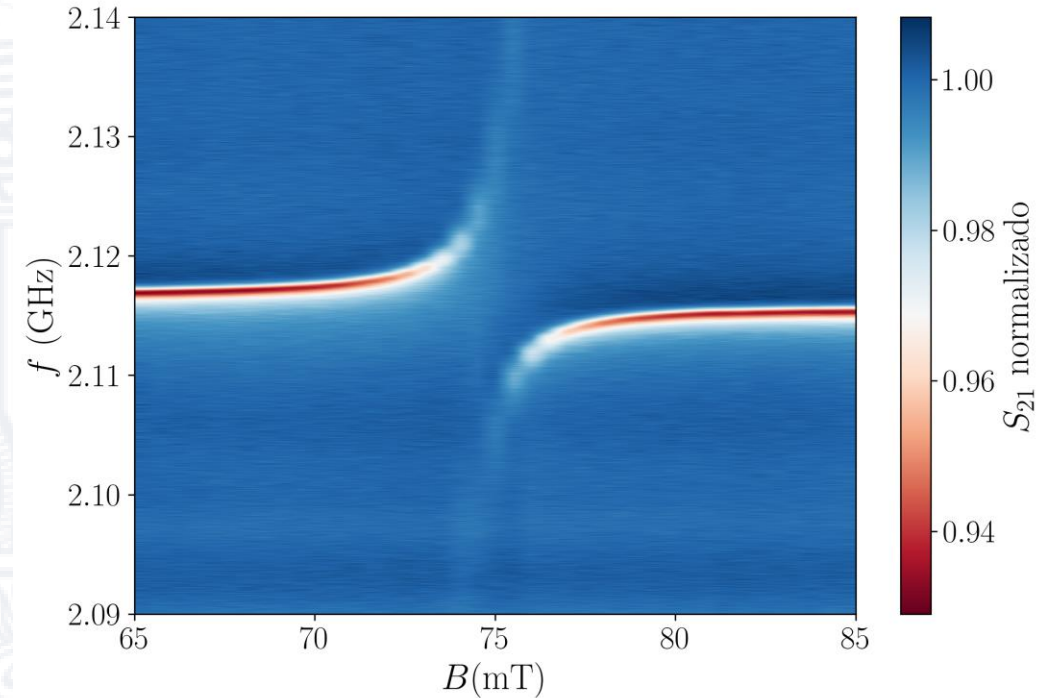
- Ruido gaussiano de amplitud aleatoria entre 0 y 25% del valor



Datos experimentales. Algunos cambios

- 41 valores de \vec{B} , 2500 cortes f (GHz)
- ΔE conocido (conocemos B)
- Nueva función de transmisión:

$$S_{21}(\omega) = 1 - \frac{\kappa_c}{i(\Omega - \omega) + i\kappa + \frac{g^2}{i(\Delta E - \omega) + \gamma}}$$



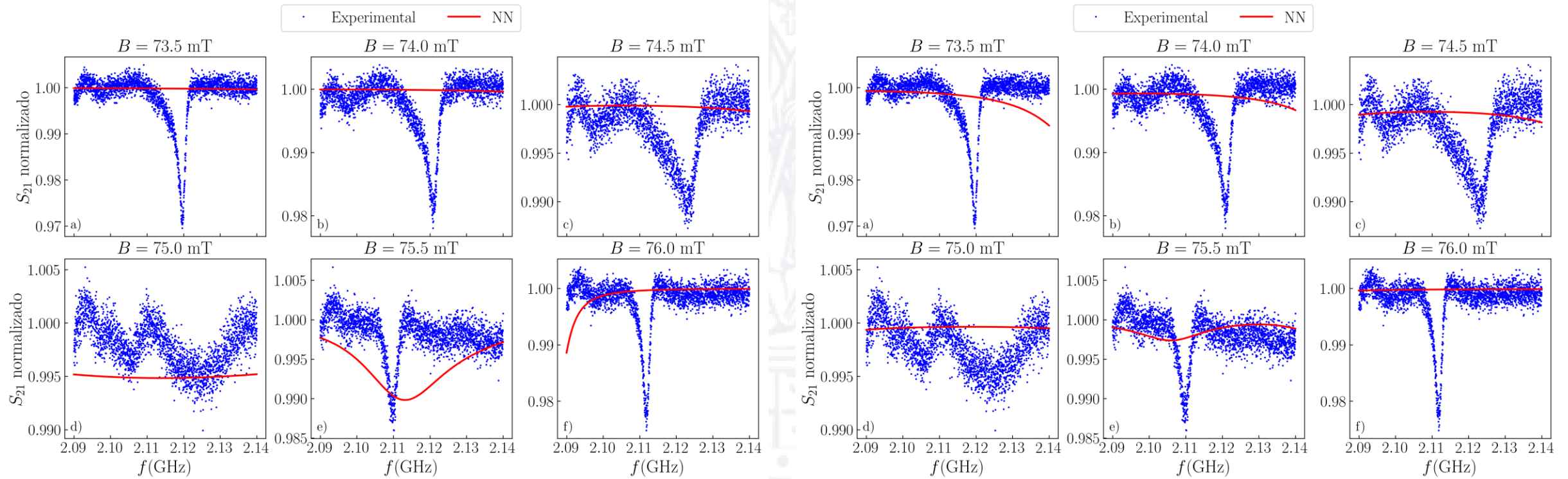
Marcos Rubín Osanz. «*Pump-probe experiments on superconducting resonators coupled to molecular spins*». Tesis doctoral. Universidad de Zaragoza, 2024.

Datos experimentales. Modelo sin ruido (I)

■ $\kappa_c \in [10^{-5}, 10^{-3}]$

γ a predecir

γ fijo

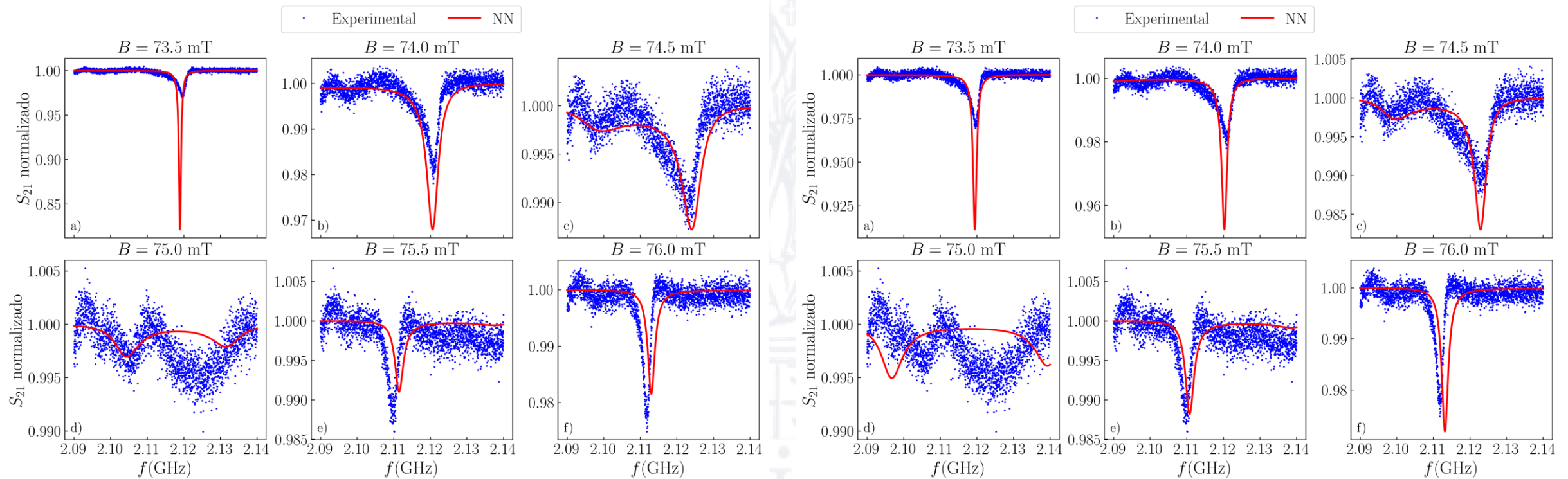


Datos experimentales. Modelo sin ruido (II)

- $\kappa \in [10^{-4}, 10^{-3}]$, $\kappa_c \in [10^{-5}, 10^{-4}]$, $g \in [10^{-2}, 1.5 \cdot 10^{-2}]$, $\gamma \in [5 \cdot 10^{-4}, 8 \cdot 10^{-3}]$
 $\Omega = 2.116451 \text{ GHz}$ (resonancia de la cavidad)

γ a predecir

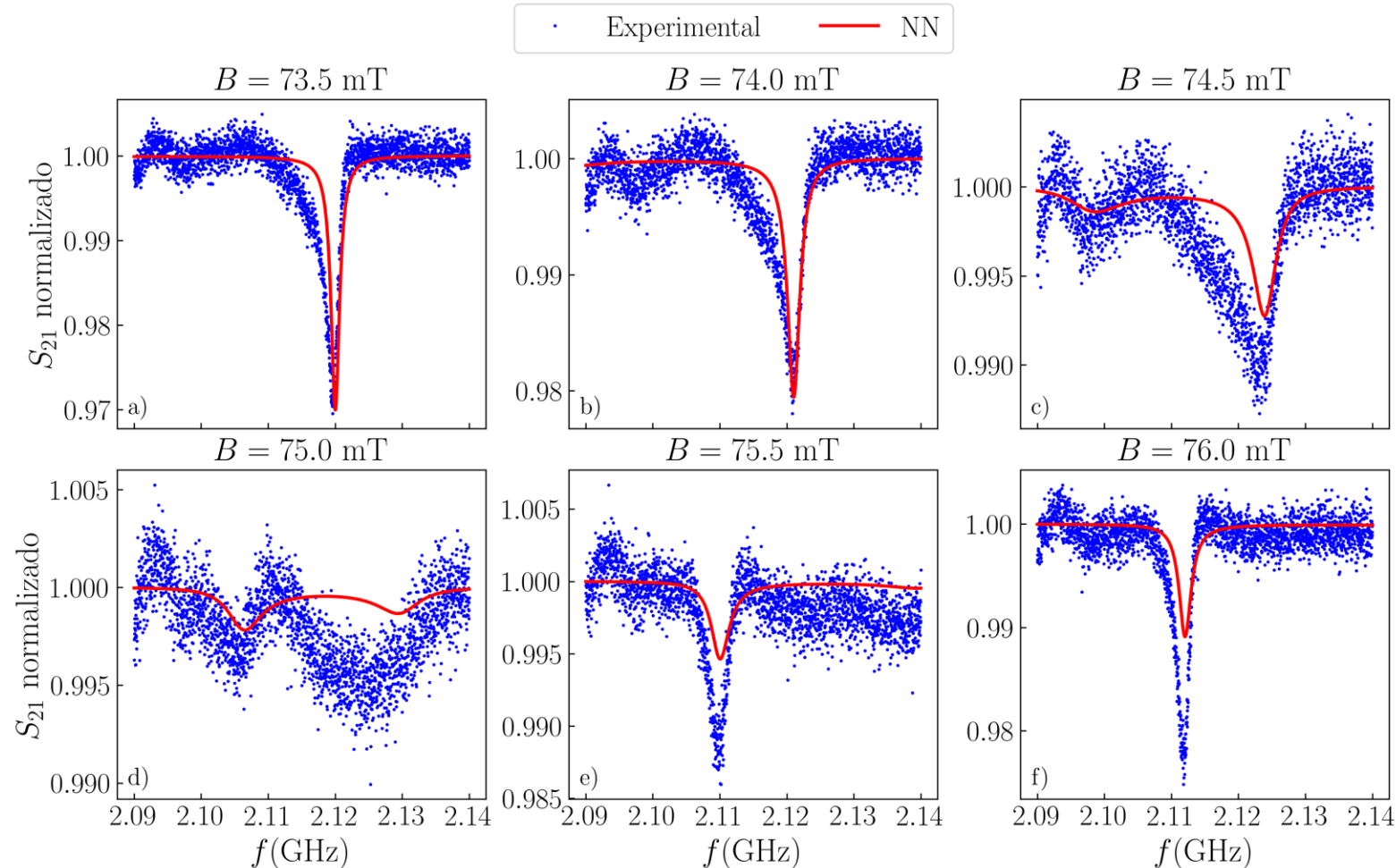
$\gamma = 6.5 \text{ MHz}$ (cte. del compuesto)



Datos experimentales. Modelo sin ruido (III)

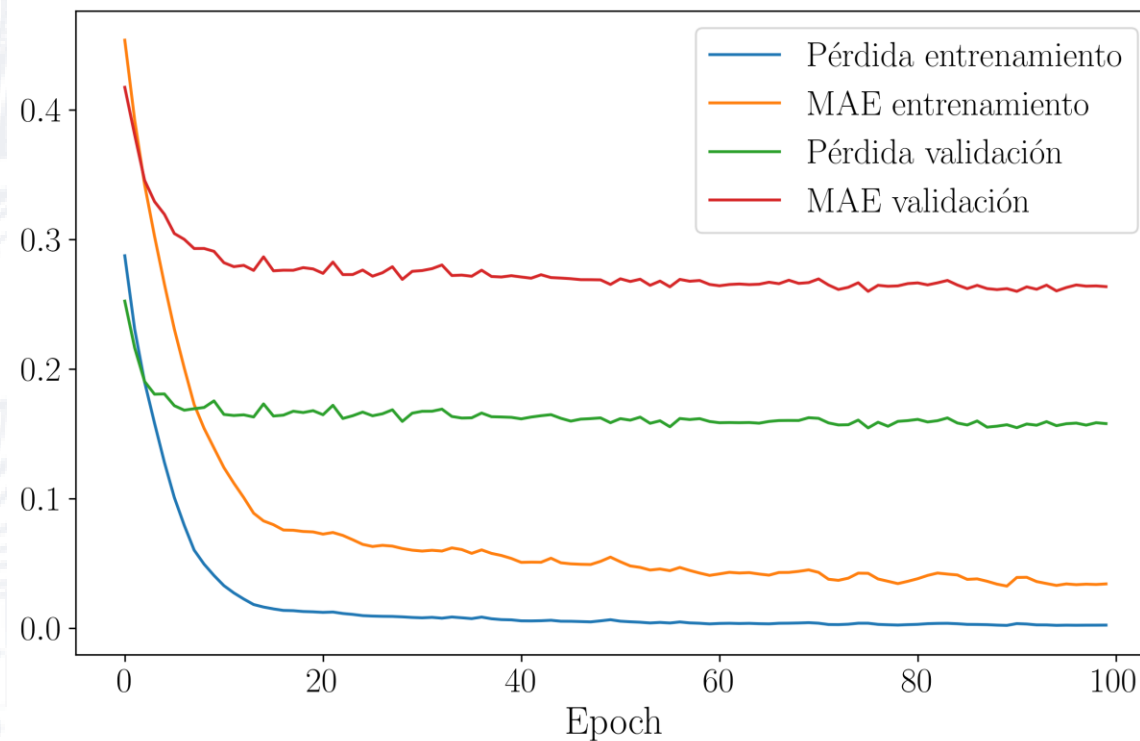
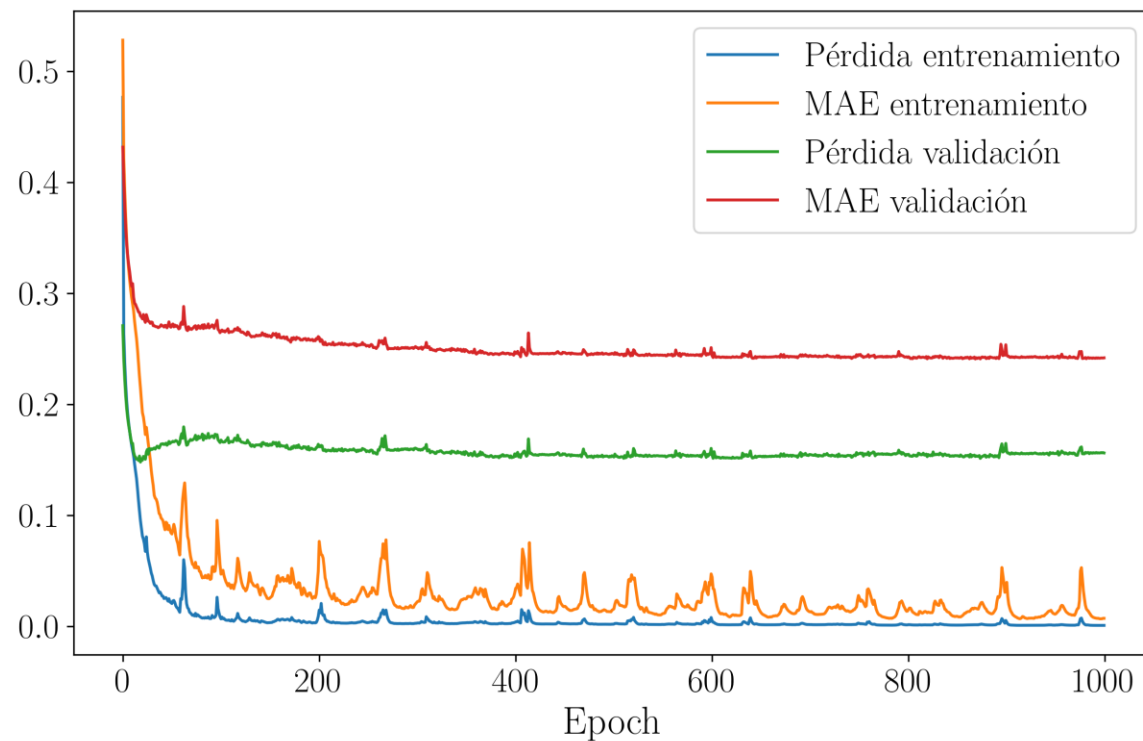
- $\kappa \in [2 \cdot 10^{-4}, 6.5 \cdot 10^{-3}]$, $\kappa_c \in [1.5 \cdot 10^{-5}, 3.5 \cdot 10^{-5}]$, $g \in [1.15 \cdot 10^{-2}, 1.35 \cdot 10^{-2}]$

$$\gamma = 6.5 \text{ MHz}$$



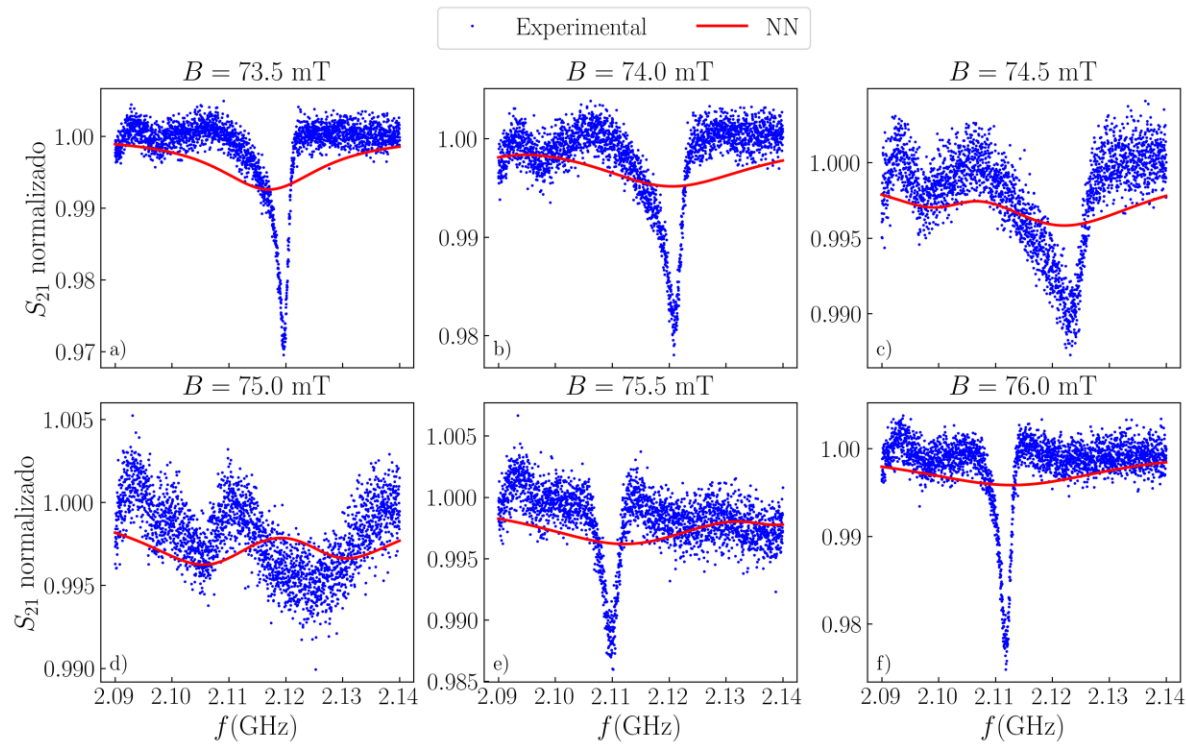
Datos experimentales. Modelo con ruido (I)

- Nuevo estudio de hiperparámetros

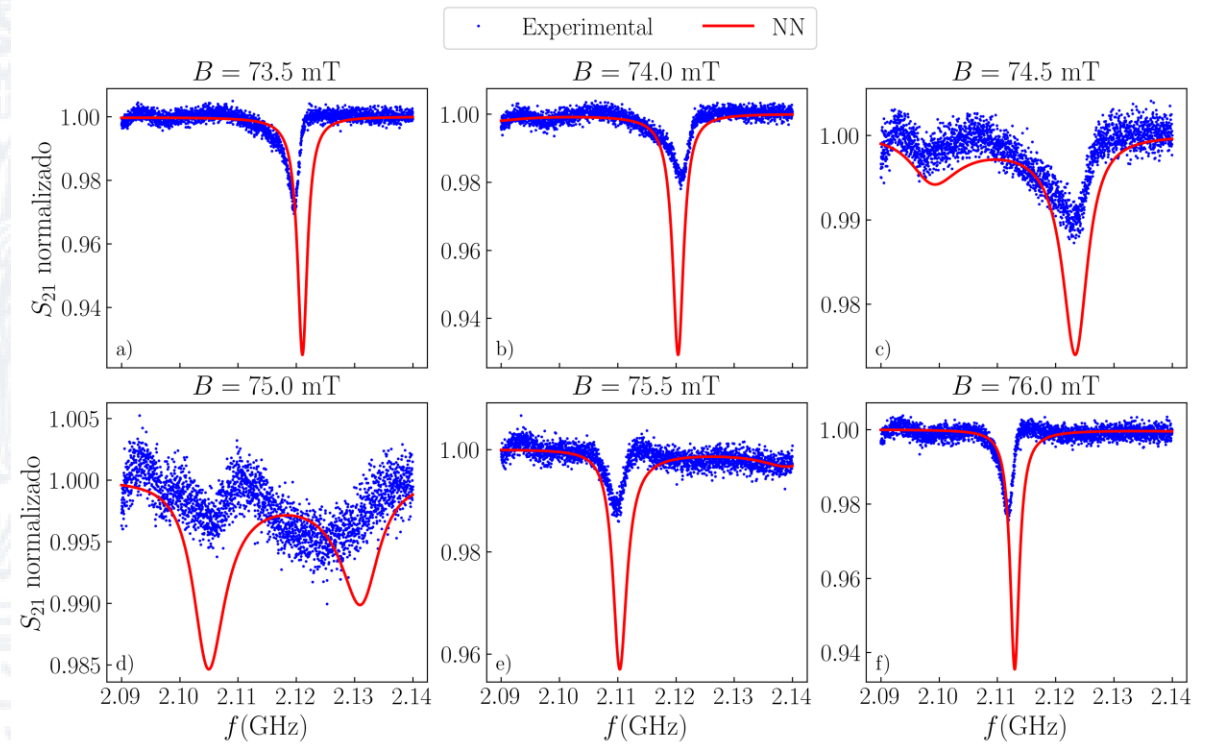


Datos experimentales. Modelo con ruido (II)

Rango general

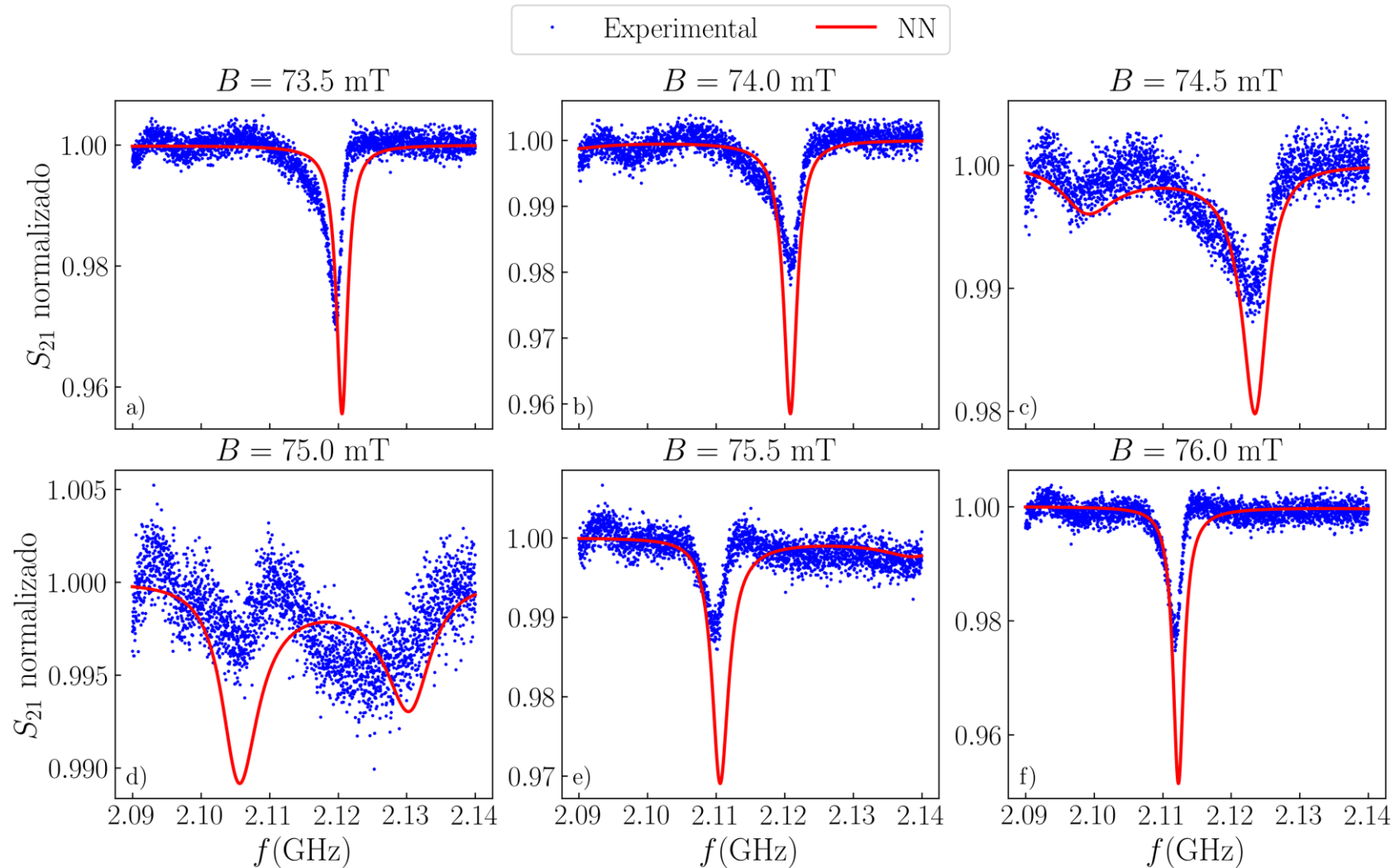


Acotamiento



Datos experimentales. Modelo con ruido (III)

Segundo acotamiento



Datos experimentales. Resultados finales

- Valores tesis: $\kappa = 415.5 \pm 0.8 \text{ kHz}$, $\kappa_c = 30.4 \pm 0.1 \text{ kHz}$, $g = 12.491 \pm 0.004 \text{ MHz}$,
 $\gamma = 6.5 \pm 0.5 \text{ MHz}$

Mejores predicciones

- Sin ruido acotado: $\kappa = 439.38 \pm 233.60 \text{ kHz}$, $\kappa_c = 38.4 \pm 19.8 \text{ kHz}$,
 $g = 11.264 \pm 1.042 \text{ MHz}$, $\gamma = 6.8 \pm 1.5 \text{ MHz}$
- Con ruido segundo acotamiento: $\kappa = 412.6 \pm 104.8 \text{ kHz}$, $\kappa_c = 31.1 \pm 12.3 \text{ kHz}$,
 $g = 12.400 \pm 0.415 \text{ MHz}$

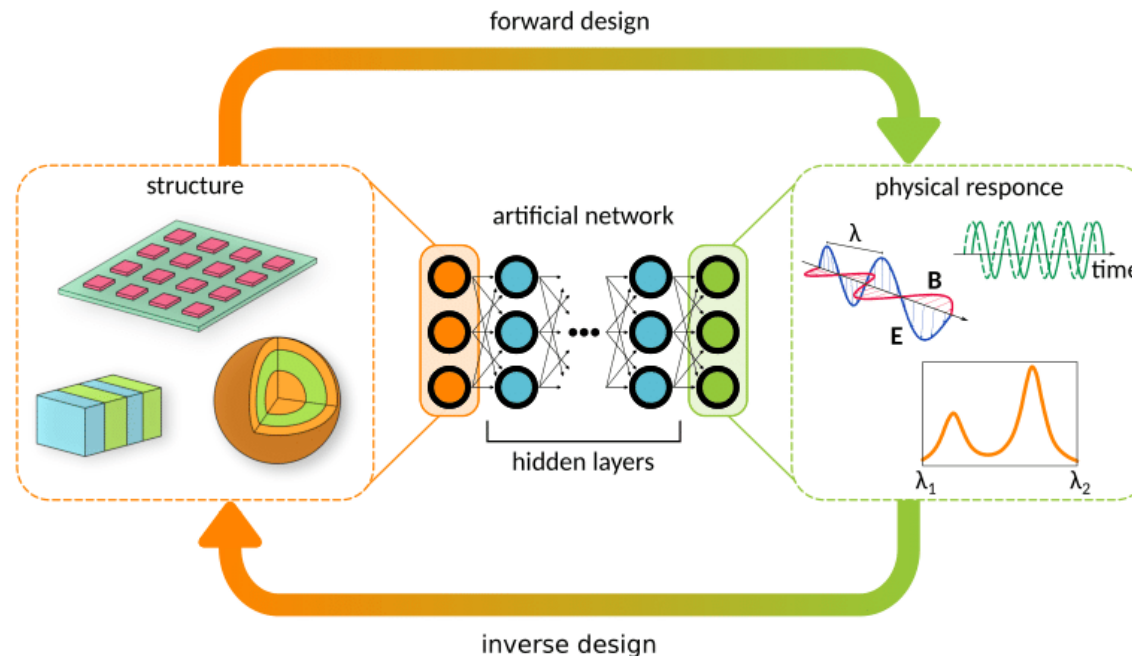
Conclusiones

- Conocer el sistema → Buenos datos de entrenamiento
- Mayor potencia computacional → Modelos más complejos
- Se cumple objetivo con nuestra propuesta



Cambios y futuros trabajos

- Diseñar un modelo más amplio y elaborado
- Modelo doble: Lineal + Inverso (tándem)



The background features a large, faint, circular watermark of the University of Konstanz seal. The seal is a complex heraldic emblem with a central shield, a crown on top, and a circular border containing Latin text. The text in the border includes "UNIVERSITAS KONSTANZIENSIS" at the top and "FUNDATA 1828" at the bottom.

¿PREGUNTAS?