

ESTIMATION DE L'ÉTAT FONDAMENTAL DU MODÈLE DE HEISENBERG SUR LE RÉSEAU KAGOME AVEC UN ALGORITHME VARIATIONNEL QUANTIQUE

PROJET D'INITIATION À LA RECHERCHE

INITIATION À LA RECHERCHE PHQ662

par

Dimitri Bonanni-Surprenant

Remis à

Yves Grosdidier



Université de Sherbrooke
Faculté des Sciences
Département de Physique
26 avril 2023

Introduction

Un liquide de spin quantique est une phase de la matière qui découle de la frustration dans un matériel. Cette approche pour expliquer le comportement de la matière a été apportée par le physicien Philip Warren Anderson en 1973 pour expliquer le comportement d'un réseau triangulaire [3]. Les liquides de spins sont intéressants à étudier car il s'agit de systèmes qui présentent beaucoup de fluctuations quantiques, ce qui fait d'eux un des matériaux avec des propriétés hors de l'ordinaire. Un autre type de réseau qui présente un comportement en liquide de spin similaire est le réseau Kagome. Dans ce projet, on cherche à estimer l'état fondamental d'un tel réseau en utilisant deux techniques, soit une diagonalisation exacte de l'hamiltonien de Heisenberg, et en utilisant une technique variationnelle pour estimer l'état fondamental.

1 Théorie

L'estimation de l'état fondamental d'un réseau appartient aux problèmes à N corps. Ce type de problème est très difficile à résoudre en général. Pour cette raison, le réseau utilisé dans ce projet comportera 12 sites afin de restreindre la complexité du calcul. L'état fondamental sera estimé en utilisant l'hamiltonien de Heisenberg, soit

$$H = t \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1)$$

avec t une constante de couplage positive, et $(\mathbf{S}_i)_j = \sigma_j$, $j \in \{x, y, z\}$, l'opérateur de moment cinétique intrinsèque au site i . Cet hamiltonien permet de capturer le phénomène d'antiferromagnétisme en privilégiant les états pour lesquels les spins sont anti-alignés. L'état fondamental de cet hamiltonien sur le réseau kagome ne sera pas simple, car le réseau est frustré géométriquement, donnant une grande dégénérescence.

1.1 Diagonalisation exacte

La diagonalisation exacte, malgré son nom, permet une approximation de l'état fondamental en diagonalisant l'hamiltonien, la matrice décrivant la dynamique du système, ayant pour valeurs propres les énergies possibles du système. En général, les hamiltoniens qu'on peut écrire pour les problèmes à N corps sont de dimension exponentielle en terme du nombre de sites, alors l'écriture de l'hamiltonien se fait dans un plus petit sous-espace. Même pour 12 sites, cet hamiltonien peut être trop grand pour pouvoir faire des manipulations dans un temps raisonnable. Pour cette raison, l'encodage utilisé fera usage du fait que le modèle d'Heisenberg utilise des matrices de Pauli, ce qui permet l'usage de chaînes de Pauli et de matrices creuses. L'utilisation de matrices creuses est pertinente, car elles permettent d'utiliser des matrices de grande dimension sans prendre toute la mémoire d'une matrice explicite. Ceci permet d'utiliser la méthode de Lanczos pour déterminer la valeur propre minimale, soit l'énergie minimale [9]. La méthode de Lanczos repose sur le fait qu'on peut restreindre l'espace des vecteurs propres au sous-espace de Krylov, dans lequel on peut écrire une matrice

tridiagonale de dimension beaucoup plus petite dont les valeurs propres extrêmes convergent aux mêmes que la matrice creuse initiale [2]. Pour ce faire, il est seulement requis de savoir comment appliquer la matrice sur un vecteur aléatoire $|\psi_0\rangle$, qui permet ensuite de bâtir une base orthogonale dans laquelle on peut écrire la matrice tridiagonale, soit

$$K = |\psi_0\rangle, H|\psi_0\rangle, \dots, H^{M-1}|\psi_0\rangle \quad (2)$$

On peut ensuite obtenir une base du sous-espace de Krylov avec la relation de récurrence

$$|\psi_{n+1}\rangle = H|\psi_n\rangle - a_n|\psi_n\rangle - b_n^2|\psi_{n-1}\rangle \quad (3)$$

$$a_n = \frac{\langle\psi_n|H|\psi_n\rangle}{\langle\psi_n|\psi_n\rangle} \quad b_n^2 = \frac{\langle\psi_n|\psi_n\rangle}{\langle\psi_{n-1}|\psi_{n-1}\rangle} \quad (4)$$

Ce qui permet ensuite d'écrire la matrice tridiagonale de dimension M qui possède les mêmes valeurs propres extrêmes

$$T = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & 0 & \cdots & 0 \\ b_1 & a_1 & b_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{M-1} \end{pmatrix} \quad (5)$$

Des modules déjà produits permettent d'implémenter directement ces techniques, tel que *QuSpin* [11]

1.2 Solutionneur de valeurs propres quantique variationnel

Le solutionneur de valeurs propres quantique (*Variational Quantum Eigensolver*) est une technique de diagonalisation qui utilise le principe variationnel pour donner une borne supérieure sur l'énergie de l'état fondamental. Cette technique dérive de la méthode variationnelle en mécanique quantique, soit reposant sur le fait qu'un état propre de l'hamiltonien

$$H|\psi_\lambda\rangle = E_\lambda|\psi_\lambda\rangle \quad (6)$$

permet d'écrire un état général du système comme une combinaison linéaire.

$$|\psi\rangle = \sum_\lambda \alpha_\lambda |\psi_\lambda\rangle \quad (7)$$

Ce qui permet d'écrire la valeur moyenne de H dans l'état $|\psi\rangle$

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = \sum_{\lambda,\rho} (\alpha_\rho^* \alpha_\lambda \langle\psi_\rho|H|\psi_\lambda\rangle) \quad (8)$$

$$= \sum_\lambda |\alpha_\lambda|^2 E_\lambda \geq E_0 \quad (9)$$

étant donné que $\sum_\lambda |\alpha_\lambda|^2 = 1$ et que $E_\lambda \geq E_0$. On peut donc utiliser ce théorème pour donner une bonne borne supérieure à l'énergie du fondamental en introduisant des paramètres à l'état d'essai $|\psi(\{\theta_i\})\rangle$ et en minimisant ainsi la fonction d'énergie $E(\{\theta_i\})$. Sur un ordinateur quantique, préparer un tel état est faisable en appliquant une porte unitaire $U(\{\theta_i\})$ qui assure un bon contrôle sur l'état. Une fois l'état préparé, la valeur moyenne est simple à prendre en effectuant les mesures appropriées.

2 Méthode

Afin de pouvoir résoudre ce problème, il faudra définir un encodage spécifique pour représenter un état sur un ordinateur quantique. Considérons un encodage d'un spin sur un qubit, soit $|0\rangle \equiv |\downarrow\rangle$, $|1\rangle \equiv |\uparrow\rangle$. Cette façon d'encoder le réseau dans l'ordinateur quantique permet d'avoir autant de spins que de qubits, soit $N = 12$ au maximum ici. Un état général $|\psi\rangle$ peut être décrit par 2^N paramètres, ce qui est un peu trop compliqué à minimiser. Il faudra donc restreindre le nombre de paramètres à ceux qui ont le plus d'importance physiquement, afin d'avoir la meilleure borne supérieure possible.

2.1 Variational Quantum Eigensolver (VQE)

La VQE (Diagonalisation Quantique Variationnelle) est un algorithme variationnel permettant l'estimation de la plus petite valeur propre d'un hamiltonien. Cette technique repose sur le principe variationnel, en calculant la valeur moyenne de l'hamiltonien en fonction de paramètres, qu'on varie afin d'obtenir la valeur minimale.

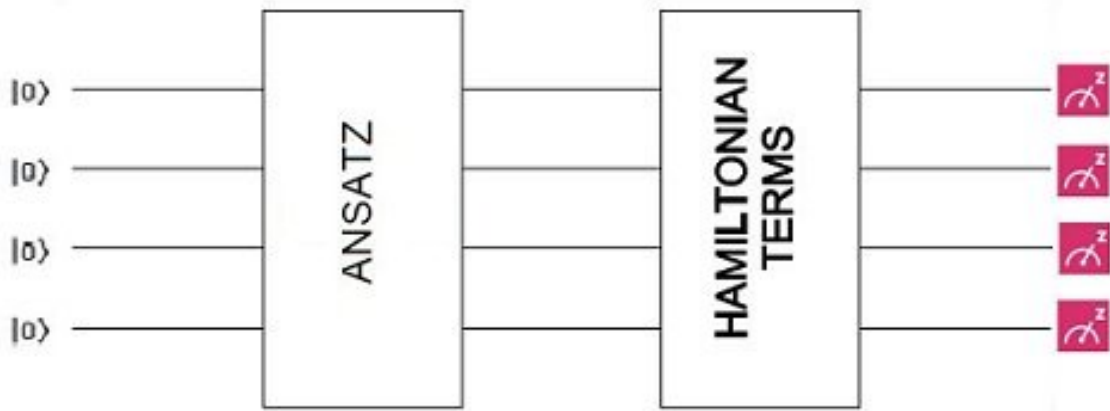


FIGURE 1 – Schéma conceptuel de la VQE (figure prise de [5]).

Trois morceaux importants figurent dans cet algorithme : l'état d'essai, les termes de l'hamiltonien et la fonction d'optimisation. Ce travail ne s'intéressait pas aux différentes techniques de minimisation de fonctions à plusieurs variables, mais une bonne exploration du domaine de l'état d'essai assure de trouver le bon minimum d'énergie associé à cet état. Tout d'abord, il faut encoder l'hamiltonien dans un circuit quantique. Or, un hamiltonien général n'est pas unitaire ; une propriété fondamentale des portes quantiques. Il est tout de fois possible d'effectuer une série de mesures qui permettent le calcul de la valeur moyenne de l'énergie. On peut décomposer l'hamiltonien sous forme de somme de valeurs moyenne d'opérateurs qui s'écrivent complètement sous forme de chaînes de matrices de Pauli. Il est simple de mesurer les valeurs moyennes de ces chaînes de Pauli, comme les valeurs moyennes des matrices de Pauli sont simple, voir la figure (2). Il suffit de mesurer les qubits dans la base

associée à l'opérateur voulu. La valeur moyenne de l'opérateur s'obtient ensuite en calculant la moyenne pondérée du résultat obtenu.

$$\langle \sigma \rangle_B = \frac{\nu_{1B} - \nu_{0B}}{N_{\text{shots}}} \quad (10)$$

$$(11)$$

où ν_{nB} est le nombre obtenu de mesure de la valeur n , soit 0 ou 1, dans la base voulue B .

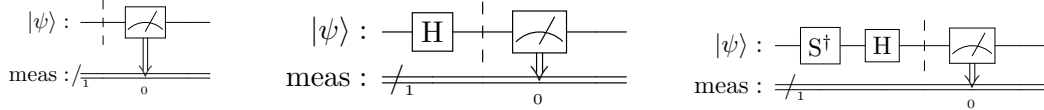


FIGURE 2 – Mesures des observables Z , X et Y respectivement. L'état représenté est un état quelconque à un seul qubit. Pour plusieurs qubits, il suffit d'appliquer le changement de base à chacun avant la mesure.

Dans le cas présent, l'hamiltonien se décompose en chaines de Pauli de la manière suivante.

$$H = t \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (12)$$

$$= t \sum_{\langle i,j \rangle} (S_{xi}S_{xj} + S_{yi}S_{yj} + S_{zi}S_{zj}) \quad (13)$$

Laissant donc trois familles de chaines de Pauli, ayant chacune seulement deux qubits à mesurer. On peut généraliser le raisonnement précédent pour obtenir la valeur moyenne d'un opérateur étant le produit tensoriel de deux fois la même matrice de Pauli, en regardant les éléments de matrice d'une telle chaine.

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_B = \frac{\nu_{0iB}^{0j} + \nu_{1iB}^{1j} - \nu_{0iB}^{1j} - \nu_{1iB}^{0j}}{N_{\text{shots}}} \quad (14)$$

où i et j sont les indices du réseau. Les ν_{niB}^{mj} représentent le nombre de mesures dans la base B ayant obtenue m pour le j ième qubit et n pour le i ième qubit.

Le coeur du problème se situe dans l'état d'essai. Un état d'essai parfait aurait un domaine de paramètre permettant d'atteindre le vrai minimum d'énergie, tout en ayant très peu de paramètres libres de varier. Or, tel que mentionné, un état général pour un réseau à 12 spins possède 2^{12} degrés de liberté. Il s'agit alors d'un effort de modélisation qui permet de trouver le meilleur état d'essai. La technique utilisée dans ce travail sera de se pencher sur la physique du problème afin de cerner les meilleurs degrés de liberté à considérer. Tout d'abord, étant donné que l'on s'attend à un liquide de spin comme état fondamental, il faut que ceux-ci puissent avoir n'importe quelle orientation, tant que les voisins les plus proches sont anti-alignés. Pour cette raison, l'état d'essai à privilégier devra favoriser cette caractéristique. Pour y arriver, 2 états d'essai ont été conçu avec cette idée en tête.

Le premier état d'essai à considérer est très simple, avec 24 paramètres libres.

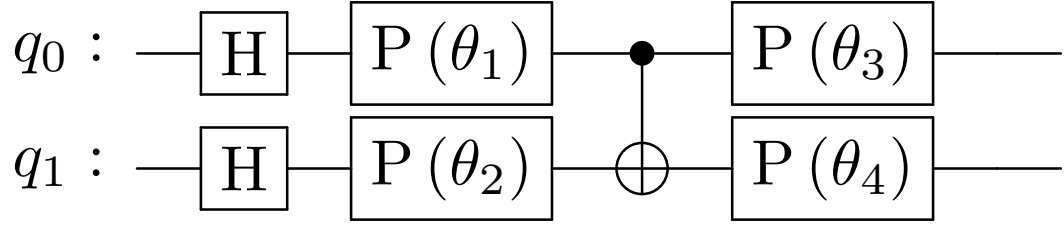
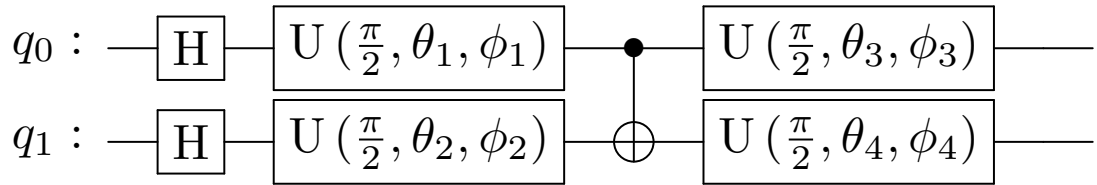


FIGURE 3 – Bloc de circuit préparant le premier état d’essai. Ce bloc est répété entre chaque qubits présentant un lien dans le réseau. Les deux qubits représentés sont ceux pour lesquels un lien existe sur le réseau, il n’y aurait pas de porte CX entre deux site pour lesquels il n’y a pas de lien.

Les paramètres libre de ce circuit contrôles les phases individuelles de chaque qubit avant et après le terme d’interaction, représenté par la porte CX . Ceci permet d’approcher le minimum car cet état permet la minimisation du terme en chaine de Pauli contenant des matrices XX . En effet, avec les bons paramètres, il est possible de sélectionner seulement des états pour lesquels les valeurs moyennes des matrices XX sont négatifs. Ces mêmes états donnent des valeurs moyennes nulles pour les autres chaines de Pauli, contenant les YY et les ZZ . Le second état d’essai à considérer apporte cette idée plus loin. Avec 2 fois plus de paramètres, on peut ajouter une inclinaison par rapport au plan O_{xy} , sur la sphère de Bloch, supplémentaire aux qubits.



En considérant seulement deux qubits, ces paramètres permettent entièrement de minimiser les observables ZZ , XX et YY en même temps. Dans le cas à l’étude ici, ce n’est pas le cas car les paramètres qui minimisent individuellement chaque observables ne sont pas les mêmes. Ces deux états d’essai ont un problème important, soit le fait qu’ils sont dépendant de l’ordre d’itération sur le réseau. En effet, selon l’ordre d’application des termes d’interaction, l’état obtenu ne sera pas le même. Il s’agit d’une symétrie qu’on s’attendrait à retrouver dans l’état fondamental, comme tous les liens ont le même poids dans le calcul de l’énergie du fondamental.

3 Résultats

Afin d'évaluer l'efficacité des états d'essai à trouver l'énergie minimale, on peut les comparer à des états d'essai généraux déjà implémentés dans Qiskit. À titre de référence, l'énergie minimale calculé par diagonalisation exacte était de $-21t$. Pour commencer, on peut comparer le premier état d'essai aux états fournis par Qiskit, soit

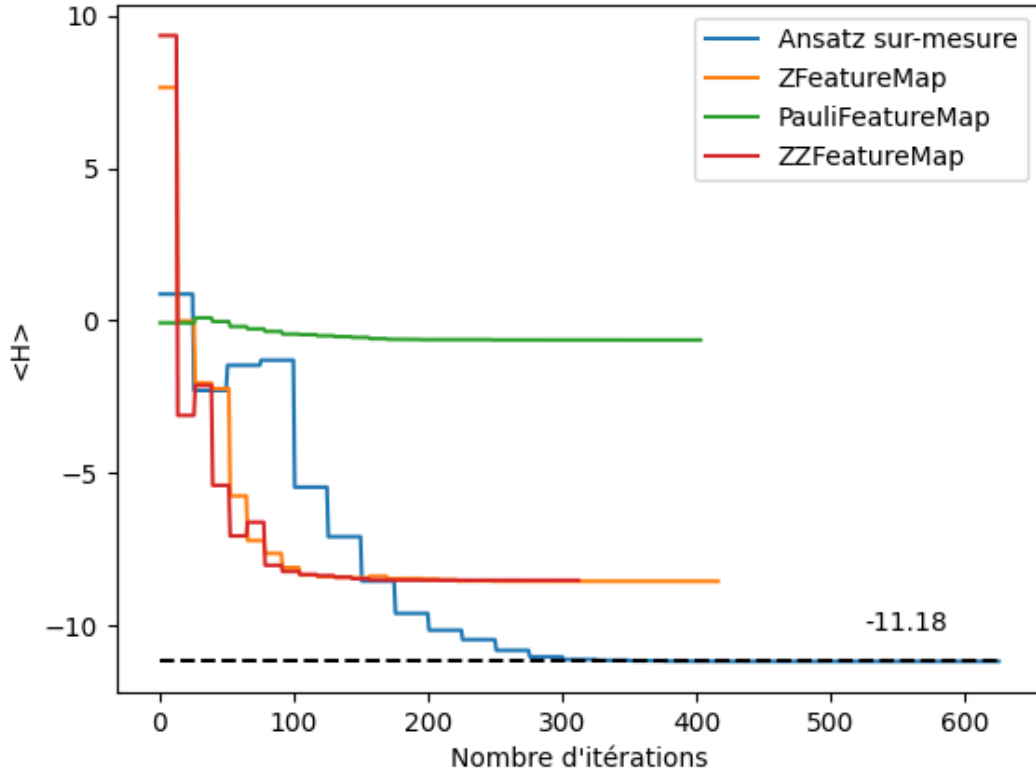


FIGURE 4 – Comparaison de la convergence des états d'essai sur la valeur minimale de l'énergie. La valeur minimale obtenue en utilisant le premier état d'essai bâti est de $-11.2t$.

Tel qu'attendu, l'état d'essai basé sur la physique du problème converge à une énergie plus basse que les autres. Ceci peut être dû au fait que l'état d'essai utilisé est exprimé en fonction de 2 fois plus de paramètres que ceux de Qiskit. On pourrait augmenter le nombre de paramètres des états d'essai fournis par Qiskit en simplement répétant plusieurs fois le circuit en introduisant des paramètres supplémentaires. Cependant, ceci augmente la profondeur du circuit de manière considérable, tandis que les portes quantiques utilisées dans le premier état d'essai développées sont toutes implémentables par un ou quelques pulses sur un véritable ordinateur quantique. Comme la profondeur du circuit joue un rôle important dans la qualité de l'état préparé, il s'agit de balancer le nombre de paramètres et la profondeur du

circuit pour assurer le meilleur rendement.

Maintenant que l'énergie du fondamental calculé en utilisant l'état d'essai bâti précédemment donne une énergie plus basse que ceux fournis par Qiskit, il est intéressant de le comparer au deuxième état d'essai bâti.

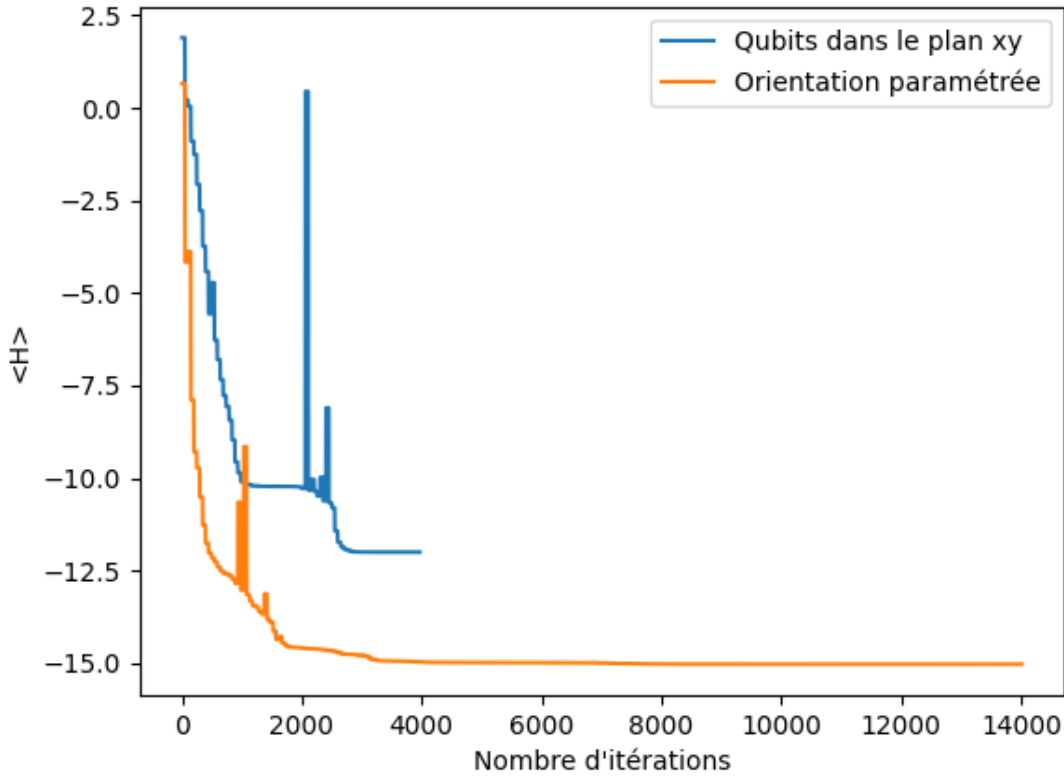


FIGURE 5 – Comparaison entre les deux état d'essai "maison". Tel qu'attendu, celui avec d'avantage de degrés de liberté permet de trouver une énergie minimale plus petite. Le minimum atteint est de $-15t$.

Tel qu'on peut le voir, en ajoutant la liberté aux qubits d'avoir une inclinaison par rapport au plan O_{xy} sur la sphère de Bloch, il est possible d'obtenir une erreur de 30% sur l'énergie minimale (comparée à la diagonalisation exacte.) Cette comparaison montre l'effet qu'a le nombre de degrés de liberté accordé à l'état d'essai sur la valeur de l'énergie du fondamental. En augmentant le nombre de degrés de libertés indépendants à l'état, il est certain que le minimum absolu de la valeur moyenne de l'hamiltonien diminue ou reste constant. Le problème est alors dans l'algorithme classique d'optimisation. Avec 2 fois plus de paramètres, le second état d'essai mène à une énergie en fonction de 48 paramètres. Il serait intéressant d'explorer les algorithmes classique d'optimisation afin de définir une limite idéale au nombre de paramètres à considérer.

Naturellement, on pourrait penser qu'en ajoutant autant de paramètres que l'on souhaite

on arrive à une énergie de plus en plus près de l'énergie exacte. Or, plusieurs autres états d'essai ont été essayés avant et après avoir bâti ceux présenté qui n'admettait pas une énergie plus basse que ceux-ci. Ceci est du au manque d'exploration du domaine en partie, mais probablement plus au fait que les paramètres ajoutés était soit redondant ou des paramètres qui n'influence pas l'énergie. Étant donné la haute dégénérescence d'un liquide de spin, il est fort probable qu'il s'agit de la seconde option, car le nombre de dégénérescence est égale au nombre de degrés de liberté qui n'influence pas la valeur de l'énergie du fondamental.

Conclusion

L'énergie de l'état fondamental du modèle de Heisenberg sur un réseau kagome a pu être calculée en utilisant la diagonalisation exacte d'un amas de 12 sites. Elle a aussi pu être approximée avec une erreur de 30% en utilisant la VQE, un algorithme variationnel quantique pour estimer la valeur propre minimale d'un hamiltonien. Cette estimation a été faite en simulation classique d'un ordinateur quantique non bruité. Plusieurs états d'essai ont pu être testés, celui donnant la meilleure énergie minimale étant celui qui a été bâti sur des arguments physiques du système. Il serait intéressant d'envoyer ces circuits sur de véritables ordinateurs quantiques, or pour avoir un résultat qui ait du sens, il faudrait travailler à diminuer la profondeur du circuit, diminuer le taux d'erreur et implémenter des techniques de mitigation d'erreur.

Références

- [1] Ibm quantum awards. <https://ibmquantumawards.bemyapp.com/#/event>. Accessed : 2023-02-20.
- [2] Templates for the solution of algebraic eigenvalue problems :. <https://netlib.org/utk/people/JackDongarra/etemplates/node103.html>. Accessed : 2023-04-26.
- [3] P.W. Anderson. Resonating valence bonds : A new kind of insulator ? *Materials Research Bulletin*, 8(2) :153–160, 1973.
- [4] Jan Lukas Bosse and Ashley Montanaro. Probing ground state properties of the kagome antiferromagnetic heisenberg model using the variational quantum eigensolver, 2021.
- [5] Shubham Kumar, Utkarsh Singh, Bikash Behera, and Prasanta Panigrahi. Quantum simulation of ionic systems using variational quantum eigensolver on ibm quantum computer, 09 2019.
- [6] P. Nikolic and T. Senthil. Physics of low-energy singlet states of the kagome lattice quantum heisenberg antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 68 :214415, Dec 2003.
- [7] Arnaud Ralko, Frédéric Mila, and Ioannis Rousochatzakis. Microscopic theory of the nearest-neighbor valence bond sector of the spin. *Physical Review B*, 97(10), mar 2018.
- [8] Ying Ran, Michael Hermele, Patrick A. Lee, and Xiao-Gang Wen. Projected-wave-function study of the spin-1/2 heisenberg model on the kagomé lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 98 :117205, Mar 2007.
- [9] David Sénéchal. *Méthodes numériques et simulations*. 2018.
- [10] Dave Wecker, Matthew B. Hastings, and Matthias Troyer. Progress towards practical quantum variational algorithms. *Phys. Rev. A*, 92 :042303, Oct 2015.
- [11] Phillip Weinberg and Marin Bukov. QuSpin : a Python package for dynamics and exact diagonalisation of quantum many body systems. Part II : bosons, fermions and higher spins. *SciPost Phys.*, 7 :020, 2019.