

*A.A. 2024/2025*

*CORSO DI LAUREA IN FISICA*

*COMPUTAZIONE QUANTISTICA*

# EQUIVARIANT VARIATIONAL QUANTUM EIGENSOLVER TO DETECT PHASE TRANSITION THROUGH ENERGY LEVEL CROSSINGS

*BASSO MARCO*

*CARRER ALESSIA*

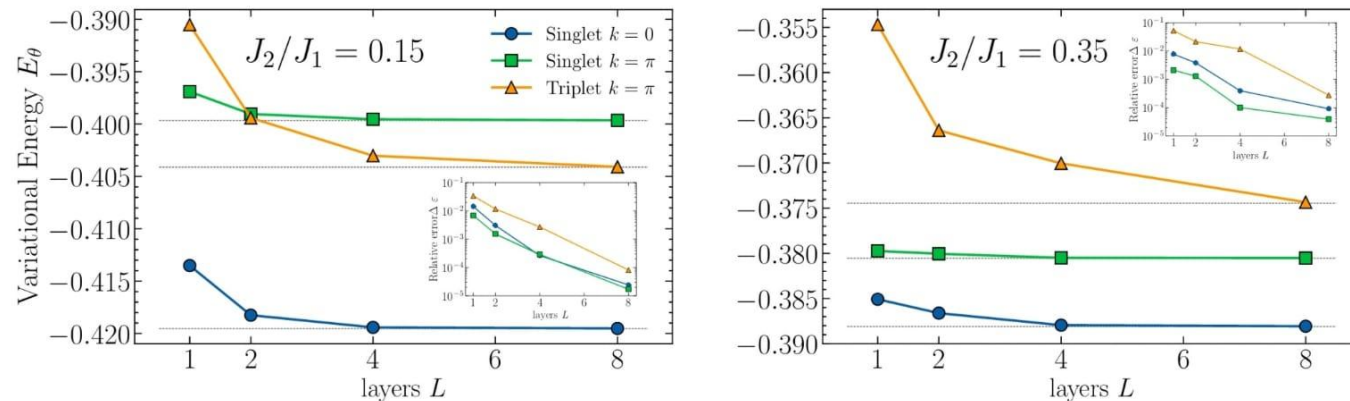
*REPIC SIMONE*

# Introduzione al problema

$$\hat{H} = J_1 \sum_{r=1}^N \hat{\mathbf{s}}_r \cdot \hat{\mathbf{s}}_{r+1} + J_2 \sum_{r=1}^N \hat{\mathbf{s}}_r \cdot \hat{\mathbf{s}}_{r+2}$$

$$J_1, J_2 \geq 0 \quad e \quad \hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2}(\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$$

Si può trovare una transizione di fase a  $J_2/J_1 = 0.24116(7)$  guardando i primi due livelli energetici eccitati.



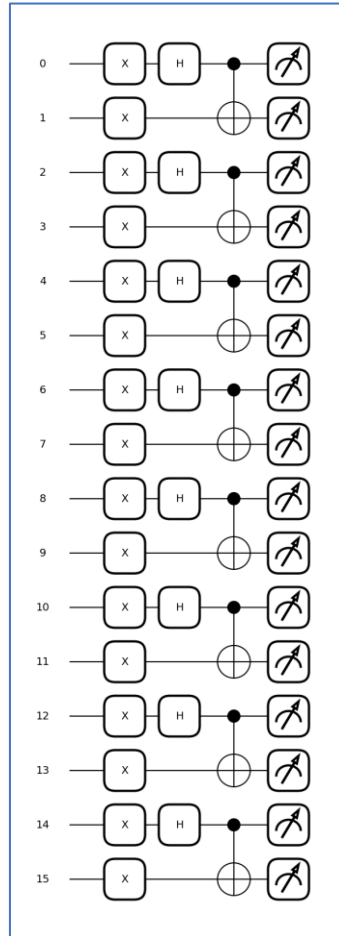
1. Creazione degli stati di partenza (singoletto e tripletto).
2. Realizzazione del circuito variazionale.
3. Implementazione degli stati variazionali  $|\psi(\vec{\vartheta}_1, \vec{\vartheta}_2)\rangle$ .
4. Calcolo dei valori di energia associati  $E(\vec{\vartheta}_1, \vec{\vartheta}_2)$ .
5. Ricerca dei parametri per la minimizzazione dell'energia.

# Trasformazione degli stati iniziali

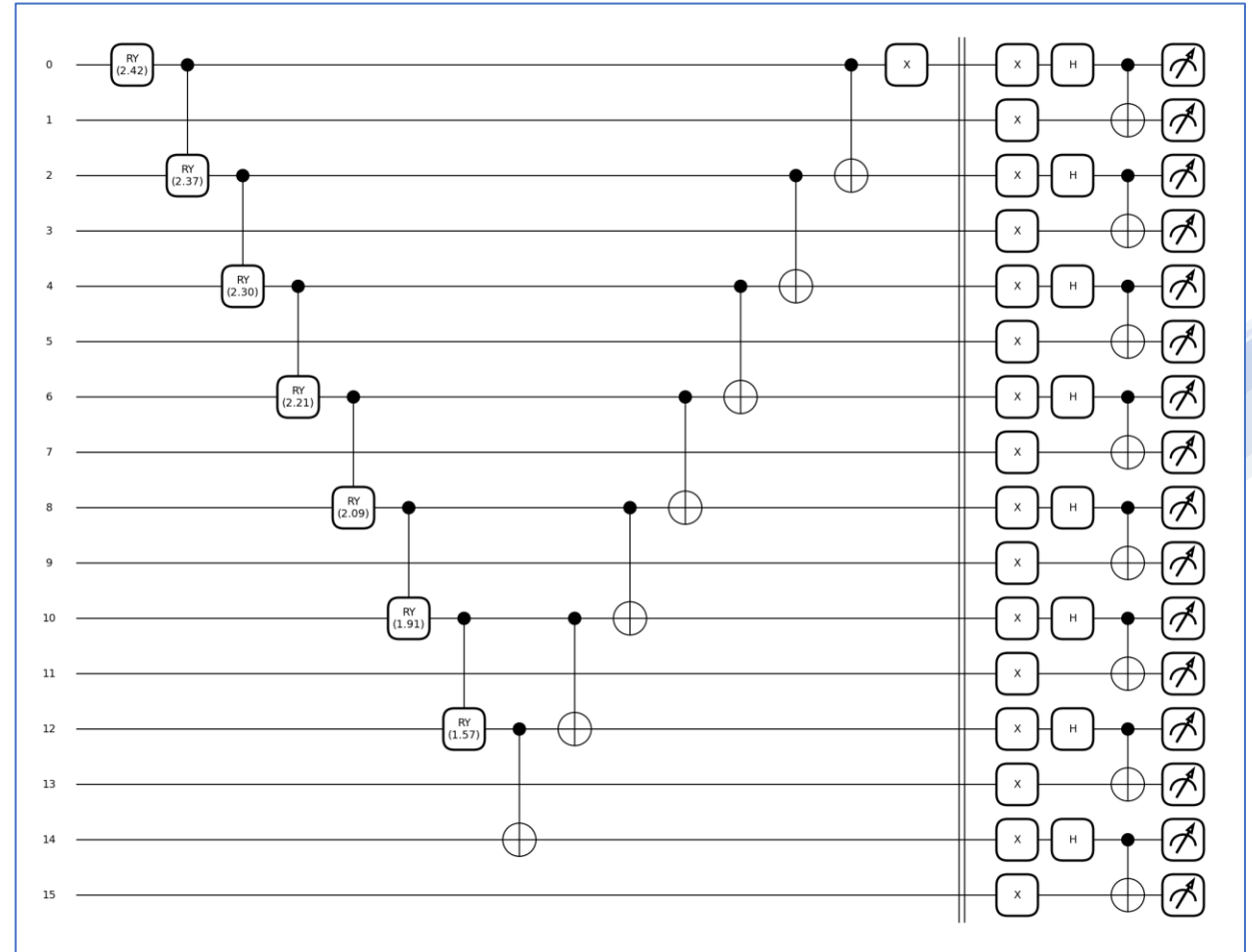
- Hamiltonian Variational Ansatz:  $[\hat{H}_1, \hat{H}_2] \neq 0$  con  $\hat{H}_1 = \sum_{r=1}^{N/2} \hat{\mathbf{S}}_{2r} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{2r+1}$  e  $\hat{H}_2 = \sum_{r=1}^{N/2} \hat{\mathbf{S}}_{2r-1} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{2r}$ .
- Trasformazione unitaria:  $\hat{U}_\vartheta = \prod_{l=1}^L e^{i\theta_2^l \hat{H}_2} e^{i\theta_1^l \hat{H}_1} = \prod_{l=1}^L \prod_{r=1}^{N/2} \Pi_\alpha e^{i\theta_2^l \hat{S}_{2r-1}^\alpha \hat{S}_{2r}^\alpha} \prod_{q=1}^{N/2} \Pi_\beta e^{i\theta_1^l \hat{S}_{2q}^\beta \hat{S}_{2q+1}^\beta}$ .
- Stato variazionale:  $|\psi_\vartheta\rangle = \hat{U}_\vartheta |\varphi\rangle$ .
- Restrizione a uno specifico spin:  $[\hat{\mathbf{S}}^2, e^{i\theta \hat{\mathbf{S}}_j \cdot \hat{\mathbf{S}}_k}] = 0 \quad \forall j, k$ .
- **Singoletto** ( $S = 0$ ):  $|\varphi_0\rangle = \prod_{r=1}^{N/2} |s\rangle_{2r-1, 2r}$  con  $|s\rangle_{r,r'} = (|0\rangle_r |1\rangle_{r'} - |1\rangle_r |0\rangle_{r'}) / \sqrt{2}$ .
- **Tripletto** ( $S = 1$ ):  $|\varphi_1\rangle = \sqrt{\frac{2}{N}} \sum_{j=1}^{N/2} |\tilde{\varphi}_1^j\rangle$  con  $|\tilde{\varphi}_1^j\rangle = |t\rangle_{2j-1, 2j} \prod_{r=1, r \neq j}^{N/2} |s\rangle_{2r-1, 2r}$   
dove  $|t\rangle_{r,r'} = (|0\rangle_r |1\rangle_{r'} + |1\rangle_r |0\rangle_{r'}) / \sqrt{2}$ .

# Preparazione degli stati iniziali

*Singoleto*



*Tripletto*

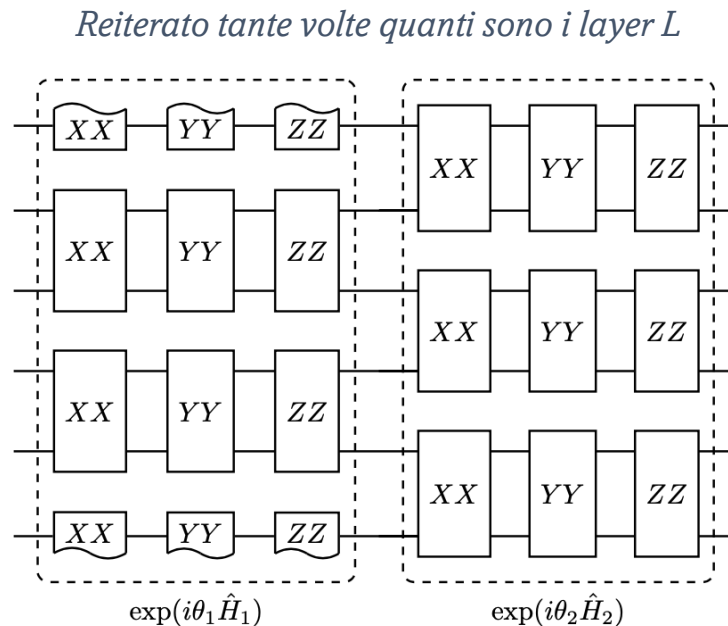


# Realizzazione del circuito

Come detto l'operatore utile alla creazione degli stati variazionali è definibile come:

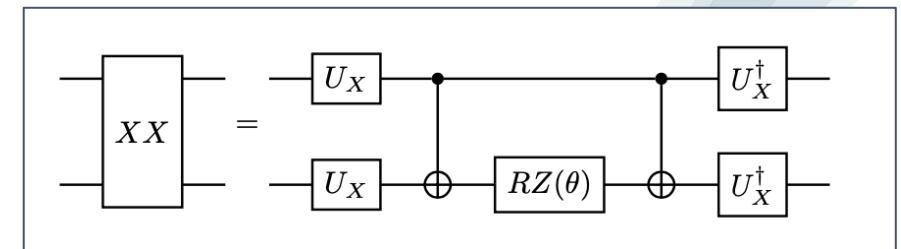
$$\hat{U}_\theta = \prod_{l=1}^L e^{i\theta_2^l \hat{H}_2} e^{i\theta_1^l \hat{H}_1}$$

Dove i circuiti impiegati nella descrizione dei singoli esponenziali sono i seguenti:



*Generalizzato naturalmente al caso di 16 qubit*

dove



Le matrici  $U_X$  sono matrici di cambiamento di base da  $\hat{\sigma}_Z$  a  $\hat{\sigma}_X$

# Implementazione di stati variazionali

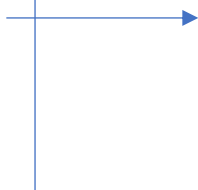
Una strategia efficace per l'approssimazione dei primi stati eccitati richiede la costruzione di stati variazionali aventi numeri quantici definiti, per cui la minimizzazione dell'energia possa essere effettuata sfruttando specifici settori di simmetria.

**Gli stati variazionali devono quindi essere invarianti rispetto agli operatori  $S^2$  e  $T$ .**

Lo stato ottenuto come  $|\Psi_\theta\rangle = \hat{U}_\theta |\phi\rangle$

è invariante rispetto a:

- $S^2$
- $T^2$



Sarà quindi possibile creare uno stato invariante sotto traslazione di singolo qubit, mediante **combinazione lineare**:

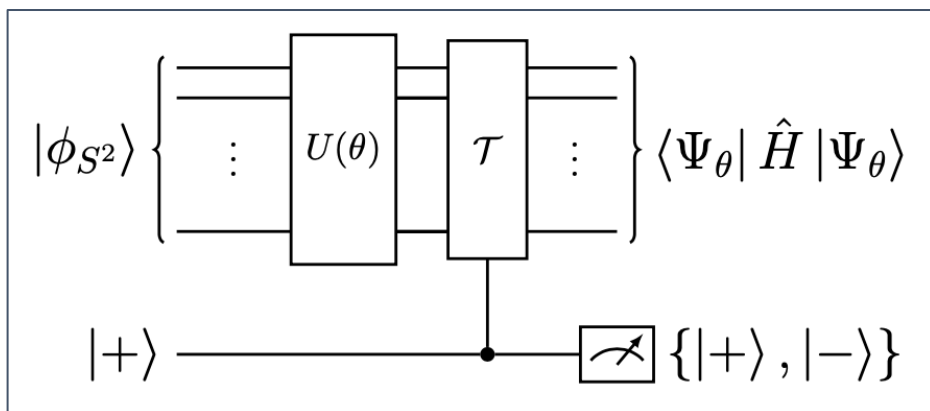
$$|\Psi_\theta^\pm\rangle = \frac{|\Psi_\theta\rangle \pm \hat{T} |\Psi_\theta\rangle}{|| |\Psi_\theta\rangle \pm \hat{T} |\Psi_\theta\rangle ||}$$

Dove la combinazione con il + sarà relativa a momento  $k=0$ .  
La combinazione con il - sarà relativa al momento  $k=\pi$ .

# Stati variazionali e valori di aspettazione

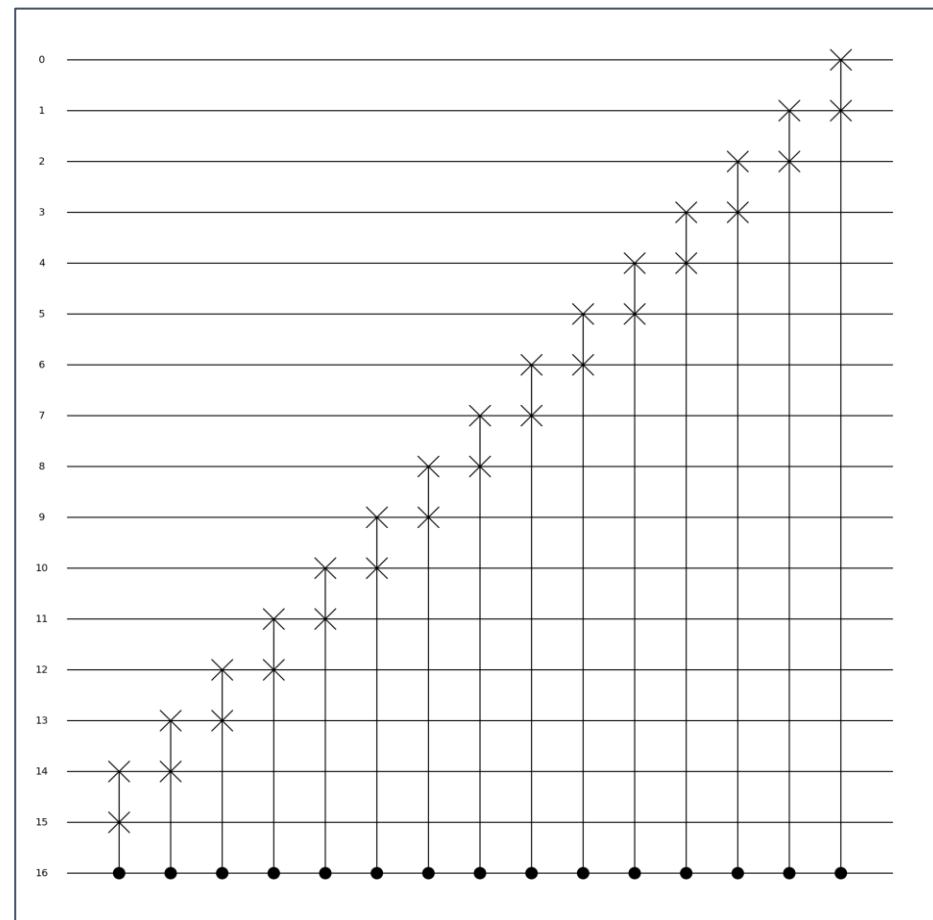
Il circuito definitivo impiegato per la realizzazione degli stati variazionali aventi le giuste simmetrie è il seguente:

*Al termine del quale sono stati calcolati i valori di aspettazione dell'hamiltoniana rispetto ai vari stati*

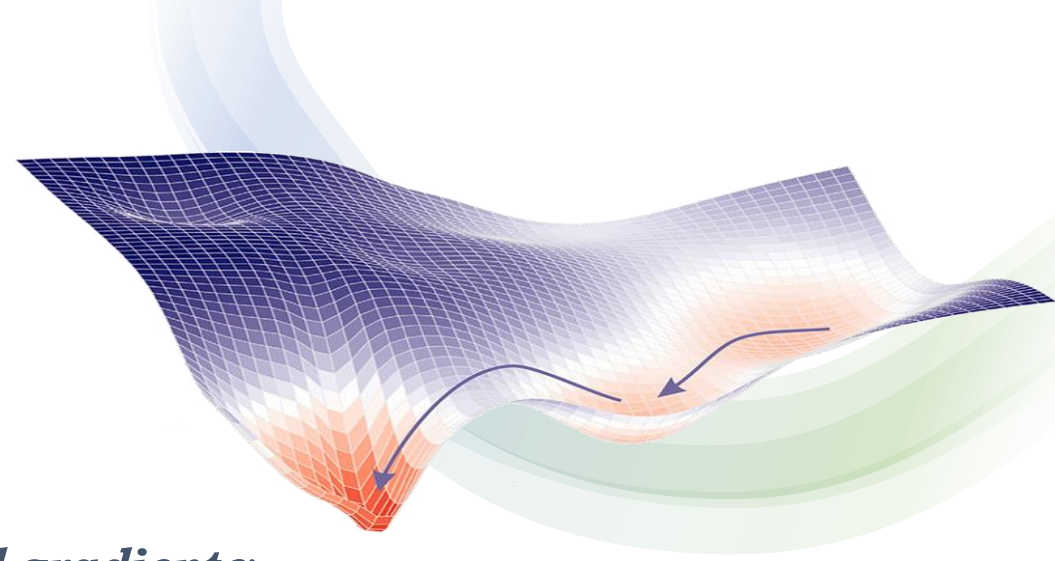


*Sfruttando un'ancella aggiuntiva e la sua misura è stato possibile ottenere sia lo stato avente momento  $k=0$  che lo stato avente momento  $k=\pi$*

L'operatore  $\mathcal{T}$  che agisce traslando tutti i qubit di un sito è stato implementando usando una serie di swap, come di seguito:



# Minimizzazione dell'energia



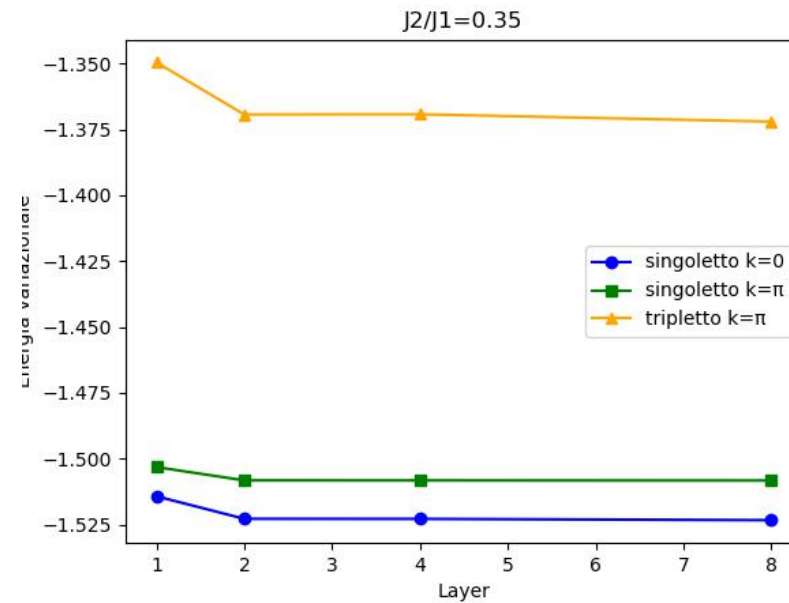
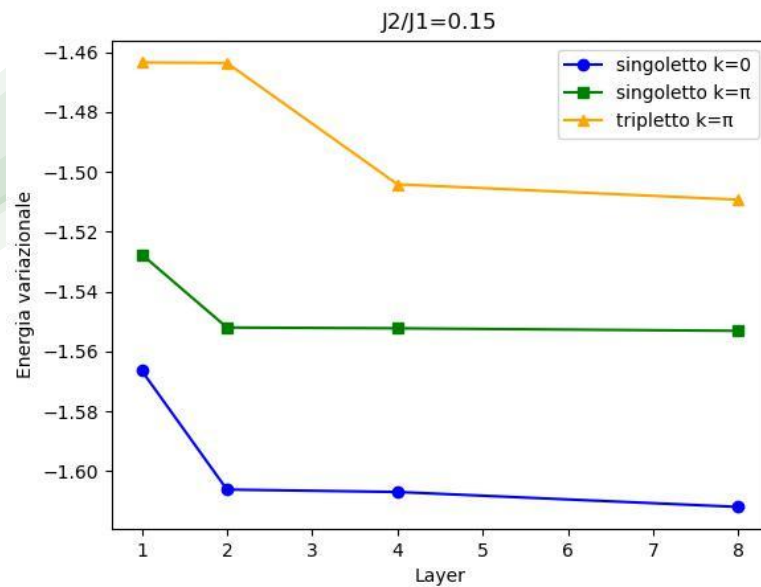
Per minimizzare l'energia si utilizza il metodo della **discesa del gradiente**:

- L'energia è funzione dei parametri (le  $\vartheta^l$ )
- Forma un (iper)piano di cui occorre trovare il punto minimo
- Si scelgono dei valori iniziali
- Si calcola il gradiente
- Si modificano i parametri per *diminuire l'energia*

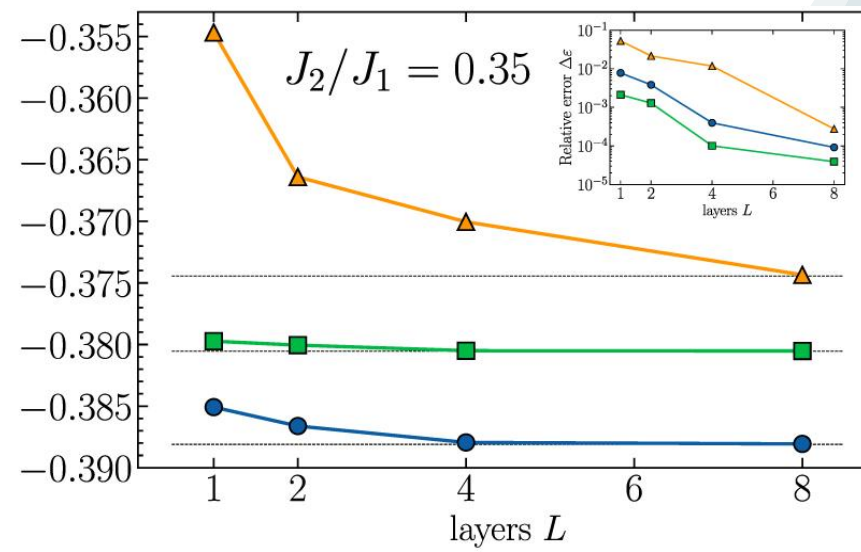
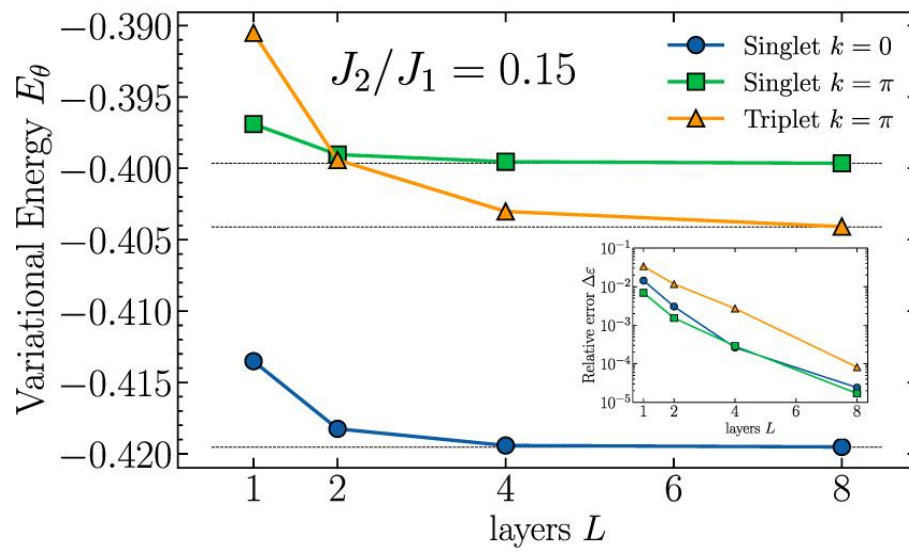
*Il processo è eseguito in buona parte automaticamente da librerie apposite  
Si sono utilizzati gli algoritmi **Adam** e **Lookahead** del pacchetto PyTorch*



## Grafici ottenuti



## Grafici del paper



# Conclusioni e debugging

- Non si è riusciti a evidenziare il level crossing
- L'errore non dovrebbe essere dovuto all'ottimizzazione
  - Sono stati usati diversi metodi
  - Sono stati utilizzati parametri iniziali simili a quelli del paper
- L'errore non dovrebbe essere dovuto all'implementazione degli stati iniziali (tripletto e singoletto)
  - Sono stati confrontati con gli stati ottenuti dagli autori del paper
- *L'errore dovrebbe trovarsi nel **circuito**, ma non è chiaro dove specificamente*

## *Miglioramenti apportabili*

- Risolvere i problemi
- Introdurre il rumore
- Aumentare la dimensionalità
- Aumentare il numero di qubit e layer
- Graficare le energie in funzione di  $J_2/J_1$  per cercare il punto critico

## *Suddivisione del lavoro*

- Preparazione degli stati iniziali: Simone Repic
- Implementazione del circuito: Alessia Carrer
- Minimizzazione dell'energia: Marco Basso
- Debugging del codice: Tutti i componenti del gruppo.