

# Implementazione dell'Hamiltoniana di Fermi-Hubbard su un computer quantistico circuitale

Tommaso Di Luciano

1 Dicembre 2023

I quantum computer si sono rivelati, sin dalla loro formulazione negli anni '80, uno strumento promettente per risolvere problemi di classi computazionali non risolvibili in tempi di ordine polinomiale su computer convenzionali.

Il concetto di computer quantistico nasce, sostanzialmente, dall'idea di sostituire ai bits, caratteristici dei computer classici, dei sistemi quantistici a due stati detti qubits. Questi, potendo trovarsi in una sovrapposizione di due stati e in entanglement tra loro, consentono di definire nuove macchine di Turing quantistiche che implicano nuove classi di complessità computazionale che in determinati casi consentono uno speed-up rispetto alle macchine classiche.

Al momento le difficoltà nel produrre qubits fisici che siano stabili, legate allo sviluppo tecnologico delle loro possibili implementazioni, ha portato alla produzione dei cosiddetti Noisy Intermediate-Scale Quantum computer (NISQ computer), attualmente sprovvisti di metodi di correzione quantistica degli errori.

In particolare i quantum computer aprono nuove importanti frontiere per quanto riguarda la simulazione di sistemi in cui sono presenti effetti quantistici.

Infatti vi è una forte analogia tra il qubit fisico e lo stato di occupazione di un fermione. Questa analogia può essere sfruttata su un computer NISQ per costruire stati che rappresentino in maniera efficace il comportamento di sistemi, come il modello di Hubbard, a patto di svolgere la computazione compatibilmente con i tempi di decoerenza dei qubits con cui è implementato.

Questo lavoro di Tesi si è concentrato sull'implementazione dell'algoritmo Variational Quantum Eigensolver (VQE) per studiare lo stato fondamentale di un reticolo cristallino monodimensionale descritto attraverso il modello di Hubbard, implementabile su computer circuitale NISQ.

Il modello di Hubbard rappresenta il comportamento elettronico caratteristico dei solidi generalizzando il modello di Tight-Binding attraverso un termine a molti-corpi di repulsione tra gli elettroni presenti su uno stesso sito atomico reticolare.

Questo comportamento è descritto da un operatore Hamiltoniano costituito da due termini, ascrivibili rispettivamente all'Hamiltoniana di Tight-Binding e alla repulsione coulombiana nel singolo sito atomico.

L'algoritmo VQE si basa sulla costruzione di un set di stati parametrizzati, detto ansatz, attraverso un computer quantistico circuitale. Su questi stati è valutato il valore di aspettazione dell'Hamiltoniana, utilizzato come funzione di costo da minimizzare per ottenere lo stato fondamentale. I parametri che definiscono gli stati sono fatti variare attraverso un algoritmo di ricerca del minimo della funzione di costo, implementato su un computer classico.

La stima dello stato fondamentale consiste nel valore di aspettazione sullo stato caratterizzato dai parametri che identificano il minimo ottenuto.

Il metodo di costruzione dell'ansatz implementato è detto Efficient Hamiltonian Variational Ansatz (EHVA) e si basa sulla costruzione degli stati attraverso una serie di step che realizzano una variazione, ispirata a quella dell'evoluzione temporale generata dall'Hamiltoniana, di stati del sistema definiti a partire dal numero di elettroni di valenza considerati.

In questo lavoro di Tesi si è partiti da esempi di implementazione forniti dalla piattaforma Qiskit di IBM Quantum Research per la risoluzione tramite algoritmi classici del modello di Hubbard e si è costruita una nuova implementazione basata sull'algoritmo VQE proposto in letteratura. Per l'implementazione si sono utilizzati fino a 12 qubits simulati attraverso il framework Qiskit. I risultati sono stati elaborati utilizzando diversi tipi di ottimizzatori classici per la ricerca del minimo e analizzando la precisione ottenuta al variare della dimensione dei sistemi considerati e degli step componenti l'implementazione dell'ansatz.

Nella **Sezione 1** viene descritta nel dettaglio l'Hamiltoniana che descrive il modello di Hubbard, esplicitando le approssimazioni con cui viene ricavata e analizzando i termini che la compongono.

Nella **Sezione 2** vengono presentati gli strumenti forniti da Qiskit per la simulazione e l'utilizzo di computer quantistici.

Nella **Sezione 3** si analizza nello specifico come avviene il passaggio tra stati fermionici e rappresentazione su qubits e viene presentata la trasformazione di Jordan-Wigner che mappa operatori di seconda quantizzazione in operatori su qubits.

Nella **Sezione 4** si forniscono le motivazioni per cui è possibile utilizzare un computer quantistico circuitale per ottenere una stima dello stato fondamentale dell'Hamiltoniana di Hubbard attraverso algoritmi variazionali e si espone la struttura generale dell'algoritmo VQE.

Nella **Sezione 5** viene descritta l'implementazione dell'algoritmo VQE su computer quantistico circuitale nel caso del modello di Hubbard per reticoli monodimensionali, presentando in maniera esplicita la costruzione dell'ansatz EHVA per l'Hamiltoniana di Hubbard.

Nella **Sezione 6** sono riportati i risultati delle simulazioni effettuate per catene di diversa lunghezza e viene analizzato il comportamento dell'algoritmo al variare degli ottimizzatori classici con cui è stato implementato e del numero di step che compongono il circuito di costruzione dell'ansatz.

In conclusione si è osservato che, simulando reticoli monodimensionali variando il numero di siti reticolari e il numero di step utilizzati per la preparazione degli stati dell'ansatz, i risultati migliori sono stati ottenuti da algoritmi di ottimizzazione di tipo globale, che effettuano la ricerca in diverse regioni dello spazio dei parametri risultando meno influenzati dalla parametrizzazione iniziale. L'errore nella stima dello stato fondamentale si attesta attorno ad alcuni punti percentuali. Per mantenere il medesimo livello di errore al crescere del numero di siti è necessario variare il numero di step.

In particolare sono stati analizzati nel dettaglio i risultati acquisiti attraverso il metodo di ottimizzazione più performante: Controlled Random Search (CRS), per reticoli composti dai due ai sei punti reticolari, simulati su un numero di qubits pari a due volte il numero di siti considerati.