

# Note Tesi

Rodolfo Carobene

Anno accademico 2020/2021

## 1 Intro Quantum Computing

L'applicazione di un'operazione su un qubit avviene tramite i cosiddetti "quantum gates". I fondamentali sono X,Y,Z (detti gate di Pauli) e H (il fondamentale Hadamard gate).

Ogni qubit è considerabile come un sistema a due livelli  $|0\rangle$  o  $|1\rangle$ , usualmente una sovrapposizione di questi stati. Per questo le operazioni possono essere scritte come matrici.

### 1.1 X gate (NOT)

$$\text{---}\boxed{X}\text{---}$$

In forma matriciale si indica

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Evidentemente, dunque, l'applicazione sugli stati fondamentali risulta:

$$|0\rangle \text{---}\boxed{X}\text{---} |1\rangle$$

$$|1\rangle \text{---}\boxed{X}\text{---} |0\rangle$$

Il caso più generale, invece:

$$\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \text{---}\boxed{X}\text{---} \alpha |1\rangle + \beta |0\rangle$$

### 1.2 Y gate

$$\text{---}\boxed{Y}\text{---}$$

In forma matriciale si indica

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Evidentemente, dunque, l'applicazione sugli stati fondamentali risulta:

$$|0\rangle \text{---}\boxed{Y}\text{---} i |1\rangle$$

$$|1\rangle \text{---}\boxed{Y}\text{---} -i |0\rangle$$

Il caso più generale, invece:

$$\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \text{---}\boxed{Y}\text{---} i\alpha |1\rangle - i\beta |0\rangle$$

### 1.3 Z gate

$$\text{---}\boxed{Z}\text{---}$$

In forma matriciale si indica

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Evidentemente, dunque, l'applicazione sugli stati fondamentali risulta:

$$|0\rangle \rightarrow \boxed{Z} \rightarrow |0\rangle$$

$$|1\rangle \rightarrow \boxed{Z} \rightarrow -|1\rangle$$

Il caso più generale, invece:

$$\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \rightarrow \boxed{Z} \rightarrow \alpha |0\rangle - \beta |1\rangle$$

## 1.4 H gate

$$\rightarrow \boxed{H} \rightarrow$$

In forma matriciale si indica

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Evidentemente, dunque, l'applicazione sugli stati fondamentali risulta:

$$|0\rangle \rightarrow \boxed{H} \rightarrow \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$|1\rangle \rightarrow \boxed{H} \rightarrow \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

Il caso più generale, invece:

$$\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \rightarrow \boxed{H} \rightarrow \frac{\alpha + \beta}{\sqrt{2}} |0\rangle - \frac{\alpha - \beta}{\sqrt{2}} |1\rangle$$

## 2 Descrizione VQE

Il Variational Quantum Eigensolver è un algoritmo ibrido che sfrutta sia le possibilità offerte da processori classici (per compiti già ottimizzabili in tempo polinomiale dall'informatica classica) sia le proprietà dei processori quantistici. L'algoritmo si compone di più fasi, data una particolare molecola:

1. Viene calcolata, nel modello di Hartree-Fock, l'hamiltoniana corrispondente alla molecola e viene scelta la configurazione iniziale.
2. Viene preparata una forma variazionale secondo il modello UCCSD (Unitary Coupled Cluster method for Single and Double excitations). Quest'ultima viene mappata su un circuito di qubit (quantum circuit) tramite una trasformazione di Jordan-Wigner.
3. Lo stato iniziale (01010), a seconda degli orbitali occupati o meno per HF, viene fatto variare tramite la UCCSD preparata.
4. Viene misurata l'energia di aspettazione tramite l'hamiltoniana ricavata precedentemente.
5. Un ottimizzatore classico si preoccupa di variare i parametri della forma variazionale e reitera il processo fino a raggiungere un minimo dell'energia.

Di questi punti solo parte del secondo e il terzo vengono svolti da quantum hardware.

### 2.1 Hartree-Fock

Il metodo Hartree-Fock è utilizzato per risolvere il problema elettronico in atomi e molecole in modo approssimato. Le posizioni dei nuclei vengono fissate e viene applicata anche l'approssimazione di Born-Oppenheimer.

Complessivamente l'hamiltoniana di singola particella è data dalla parte cinetica, dall'interazione elettrone-nucleo e dalla somma di due potenziali di campo medio: il potenziale di Hartree (che considera il campo elettrostatico classico generato dagli altri elettroni) e il potenziale di Fock (che è un corrispettivo quantistico legato alla degenerazione di scambio).

Questo metodo consente di risolvere il problema agli autovalori dell'equazione di Schrödinger in modo autoconsistente: si calcolano i potenziali di Hartree-Fock a partire da un primo ansatz, si risolve l'equazione di Schrödinger e si ricalcolano i potenziali con le nuove autofunzioni (il tutto reiterato fino a un minimo).

Per un singolo atomo:

$$V_H(\bar{x})\psi_i = \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3x \sum_j \frac{\psi_j^*(x')\psi_j(x)}{|\bar{x} - \bar{x}'|} \psi_i(x) \quad (2.1.1)$$

$$V_F(\bar{x})\psi_i = \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3x' \sum_j \frac{\psi_j^*(x')\psi_j(x)}{|\bar{x} - \bar{x}'|} \psi_i(x') \quad (2.1.2)$$

$$(2.1.3)$$

## 2.2 UCCSD et Jordan-Wigner

Nel generico modello UCC l'ansatz utilizzato è il seguente:

$$|\psi(\theta)\rangle = e^{\hat{T}(\theta) - \hat{T}^\dagger(\theta)} |\psi_0\rangle \quad (2.2.1)$$

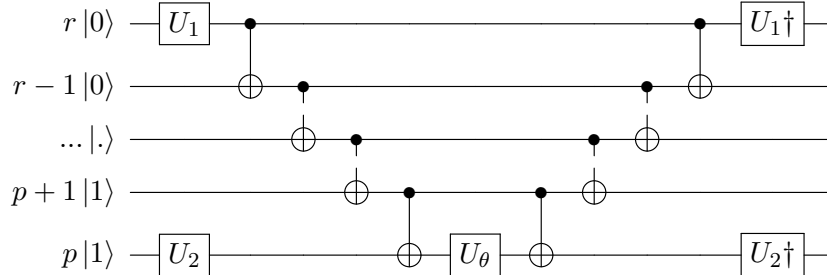
Dove  $\hat{T}$  e  $\hat{T}^\dagger$  sono gli operatori di eccitazione e diseccitazione che, genericamente, hanno ordine  $n$  ( $\hat{T} = \hat{T}_1 + \hat{T}_2 + \dots$ ). Per la forma variazionale usata in questa tesi sono considerate le eccitazioni fino al secondo ordine ( $i, j, m, n$  sono indici che variano da 1 fino al numero di orbitali presenti;  $\theta$  è una matrice di coefficienti variazionali;  $a$  e  $a^\dagger$  sono gli operatori di creazione e distruzione):

$$\hat{T}_1(\theta) = \sum_{i,m} \theta_i^m a_m^\dagger \hat{a}_i \quad (2.2.2)$$

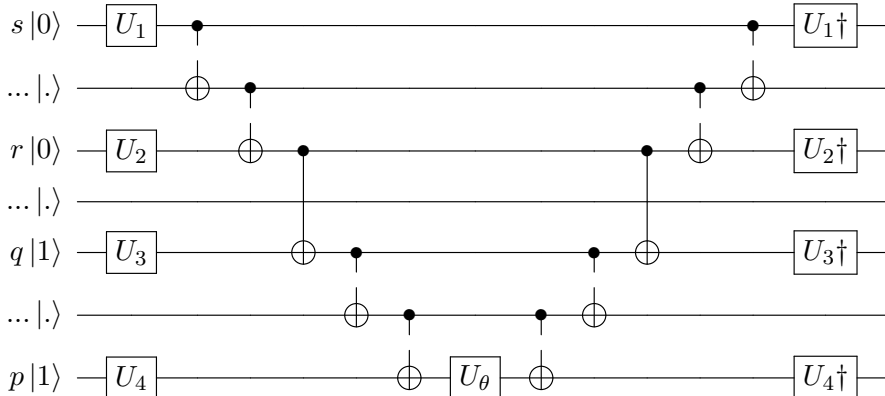
$$\hat{T}_2(\theta) = \frac{1}{2} \sum_{i,j,m,n} \theta_{i,j}^{m,n} a_m^\dagger a_n^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_j \quad (2.2.3)$$

A rendere complessa la mappatura di questa variazionale su un computer quantistico è l'esponenziale, i circuiti risultano

per la singola eccitazione, con  $(U_1, U_2) = \{(Y, H), (H, Y)\}$ :



per la doppia eccitazione con,  $(U_1, U_2, U_3, U_4) = \{(H, H, Y, H), (Y, H, Y, Y), (H, H, H, Y), (Y, H, H, H), (H, Y, H, H), (Y, Y, Y, H), (Y, Y, H, Y)\}$ :



Gli indici p,q si riferiscono a orbitali virtuali, r ed s a orbitali occupati. In linee tratteggiate sono indicati elementi ripetuti attraverso vari qubit. Di seguito la spiegazione e definizione degli U-gate e dei CNOT-gate.

La forma variazionale ha come chiave di volta  $U(\theta)$  che risulta:

$$\hat{U}(\theta) = e^{\hat{T}(\theta) - \hat{T}^\dagger(\theta)} = \quad (2.2.4)$$

$$= \exp \left( \sum_{ij} \theta_{ij} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \sum_{ijkl} \theta_{ijkl} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l - \sum_{ij} \theta_{ij} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i - \sum_{ijkl} \theta_{ijkl} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i \right) \quad (2.2.5)$$

Dove  $\theta = \{\{\theta_{ij}\}, \{\theta_{ijkl}\}\}$ .

A questo punto possiamo applicare l'approssimazione di Trotter ovvero:  $e^{\hat{A}+\hat{B}} \approx e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}$ .

$$\hat{U}(\theta) = \prod_{ij} \exp \left( \theta_{ij} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j - \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i) \right) \times \prod_{ijkl} \exp \left( \theta_{ijkl} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l - \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i) \right) \quad (2.2.6)$$

Solo a questo punto possiamo mappare sui qubit con la trasformazione di Jordan-Wigner.

$$\hat{a}_j = 1^{\otimes j} \otimes \frac{1}{2} \left( \hat{X} + i\hat{Y} \right) \otimes \hat{Z}^{\otimes N-j-1} \quad (2.2.7)$$

$$\hat{a}_j^\dagger = 1^{\otimes j} \otimes \frac{1}{2} \left( \hat{X} - i\hat{Y} \right) \otimes \hat{Z}^{\otimes N-j-1} \quad (2.2.8)$$

Dove gli operatori X,Y,Z sono quelli di pauli:  $\hat{X} = \hat{\sigma}^x$ ,  $\hat{Y} = \hat{\sigma}^y$ ,  $\hat{Z} = \hat{\sigma}^z$ . E invece  $j$  varia da 0 a  $N_q - 1$ , con  $N_q$  il numero di qubit utilizzati.

### 2.2.1 UCCSD applicata

Nel nostro caso stiamo studiando il ground state dello molecola  $H_3^+$ . Dobbiamo considerare 3 orbitali 1S per un totale di 6 orbitali di spin. Ad ognuno di questi orbitali di spin sarà assegnato un qubit iniziale  $|0\rangle$  o  $|1\rangle$  a seconda dell'occupazione del modello HF.

In prima battuta sembrerebbe che la UCCSD necessiti di  $3^2 + 3^4 = 90$  parametri, ma bisogna considerare che non tutte le eccitazioni sono possibili: infatti la UCCSD è una forma variazionale che considera invariato il numero di particelle e lo spin totale.

Utilizzando l'ordinamento di Qiskit denoto gli orbitali di spin con  $[0, 1, 2, 3, 4, 5]$  dove i primi tre hanno spin up (orbitali  $\alpha$ ) e gli ultimi tre hanno spin down (orbitali  $\beta$ ).

Considerando uno stato iniziale a spin nullo, gli orbitali inizialmente occupati sono  $[0, 3]$  e le eccitazioni singole saranno:

$$[0] \rightarrow [1]$$

$$[0] \rightarrow [2]$$

$$[3] \rightarrow [4]$$

$$[3] \rightarrow [5]$$

Mentre invece le eccitazioni doppie:

$$[0, 3] \rightarrow [1, 4]$$

$$[0, 3] \rightarrow [1, 5]$$

$$[0, 3] \rightarrow [2, 4]$$

$$[0, 3] \rightarrow [2, 5]$$

In totale avrò dunque, in questo caso, una forma variazionale a soli 8 parametri.

## Riferimenti bibliografici

- [1] autore. «titolo». In: *rivista* volume.numero (9999).