ALGORITMOS VARIACIONALES PARA SISTEMAS ABIERTOS

Rodrigo Segura Moreno¹, Ricardo Gutiérrez Jáuregui² ro.sgr@ciencias.unam.mx

- Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México.
- Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.







SISTEMAS CERRADOS

Metodología (Simulación molecular)



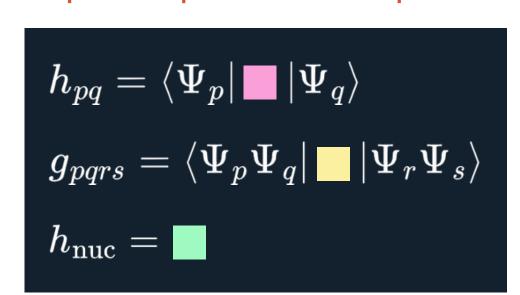
Principio variacional

El principio variacional nos dice que el estado esperado de un hamiltoniano se encuentra acotado inferiormente por la energía mínima posible del sistema E_0 , i.e.

$$E_0 \leq rac{raket{\Psi|\mathcal{H}|\Psi}}{raket{\Psi|\Psi}}$$

Aquí $\Psi=\Psi(lpha_1,lpha_2,\cdots)$ con $lpha_i$ un parámetro. La idea consiste en variar los parámetros de Ψ de modo tal que el valor de \mathcal{H} sea minimizado.

La base escogida determinará los elementos de matriz para la representación ocupacional.



Representación ocupacional

Se busca escribir al problema molecular en la representación ocupacional (segunda cuantización) para llevarlo al lenguaje de *qubits*.



$$|n_1,n_2,\cdots,n_lpha,\cdots
angle=rac{1}{\sqrt{N!}}\,\,{\cal A}\bigotimes_lpha\Psi_lpha^{\otimes n_lpha};$$

$${\cal A}=rac{1}{N!}\sum_{lpha}(-1)^{\sigma_lpha}\hat{P}_lpha$$

Hamiltoniano electrónico

$$\mathcal{H} = -\sum_i rac{
abla_i^2}{2} - \sum_{i,A} rac{Z_A}{r_{iA}} + \sum_{i < j} rac{1}{r_{ij}} + \sum_{A < B} rac{Z_A Z_B}{R_{AB}}$$

$\mathcal{H} = \sum_{pq} h_{pq} a_p^\dagger a_q + rac{1}{2} \sum_{pqrs} g_{pqrs} a_p^\dagger a_q^\dagger a_s a_r + rac{1}{2} h_{ m nuc}$

Introducción

para computadoras cuánticas [1,2].

Fermiones a qubits

Los algoritmos cuánticos variacionales (VQAs) son cruciales para abordar

problemas de optimización de energía de sistemas cuánticos planteados

Extender los VQAs para un sistema abierto (sistema que interactúa con su

entorno, intercambiando energía, información o partículas) resulta crucial

para una adecuada caracterización del sistema mismo y su entorno, así

El objetivo de este trabajo consistió en comprender la aplicación de

VQAs para el estudio de sistemas abiertos. Motivado a partir de la

simulación del estado base de una molécula de hidrógeno mediante el

Variational Quantum Eigensolver (VQE) se explicó como se realizaría la

como una ventaja computacional respecto su versión clásica [3].

simulación de sistemas abiertos con VQAs.

Se desea llevar el álgebra fermiónica de los operadores de aniquilación en términos de operadores para qubits, i.e. matrices unitarias.

El mapeo empleado a lo largo de este trabajo (para sistemas cerrados) fue la transformación de Jordan-Wigner (JW):

$$a_j\mapsto A_j=\left(igotimes_{k=0}^{j-1}Z_k
ight)rac{1}{2}(X+iY)_j$$

$$a_j^\dagger \mapsto A_j^\dagger = \left(igotimes_{k=1}^{j-1} Z_k
ight) rac{1}{2} (X-iY)_j$$

donde $X_i=\sigma_i^x,\;Y_i=\sigma_i^y$ y $Z_i=\sigma_i^z$ son los operadores de Pauli que actuan sobre el j-ésimo qubit.

Ejemplo. Molécula de hidrógeno

Base mínima para hidrógeno molecular $oldsymbol{\mathrm{H}}_2$

La base espacial para un sólo átomo de hidrógeno es [4]

$$\phi_{1
m s}^{
m CGF}(\zeta=1.24)=d_{13}\phi_{1
m s}^{
m GF}(lpha_{13})+d_{23}\phi_{1
m s}^{
m GF}(lpha_{23})+d_{33}\phi_{1
m s}^{
m GF}(lpha_{33})$$
 donde

$$\phi_{1 ext{s}}^{ ext{GF}}(lpha,\mathbf{r}-\mathbf{R}_A) = \left(rac{2lpha}{\pi}
ight)^{3/4} e^{-lpha|\mathbf{r}-\mathbf{R}_A|^2}$$

es un orbital Gaussiano 1s, aquí lpha es el exponente orbital Gaussiano y $\, {f R}_A \,$ la distancia del electrón al núcleo (en este caso el núcleo A).

Los orbitales moleculares simétrico y antisimétrico son

$$\psi_+ = arphi_A + arphi_B = looble$$
 $\psi_- = arphi_A - arphi_B = looble$

aquí $\varphi_{A(B)}$ funciones centradas en el núcleoA(B) dadas por

Con las contribuciones de espín hay cuatro espín-orbitales

$$|\chi_1
angle = igtriangle |\chi_3
angle = igtriangle |\chi_3
angle$$

aquí 🛆 (▽) representa espín arriba (abajo).

 $|\chi_2
angle = igcup igces$

 $|\chi_4
angle = igcup
abla$

Hidrógeno molecular en segunda cuantización

$$\mathcal{H}=H^{(1)}+H^{(2)}$$

 $H^{(1)} = h_{11} \, (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2) + h_{33} \, (\hat{a}_3^\dagger \hat{a}_3 + \hat{a}_4^\dagger \hat{a}_4) \, .$

 $H^{(2)} = h_{1221} a_1^\dagger a_2^\dagger a_2 a_1 + \overline{h_{3443}} a_3^\dagger a_4^\dagger a_4 a_3 + \overline{h_{1441}} a_1^\dagger a_4^\dagger a_4 a_1 + \overline{h_{2332}} a_2^\dagger a_3^\dagger a_3 a_2 \, .$

 $+\,(h_{1331}-h_{1313})a_1^\dagger a_3^\dagger a_3 a_1 + (\overline{h_{2442}-h_{2424}})a_2^\dagger a_4^\dagger a_4 a_2 +$

 $a_1^{\dagger} + h_{1423}(a_1^{\dagger}a_4^{\dagger}a_2a_3 + a_3^{\dagger}a_2^{\dagger}a_4a_1) + h_{1243}(a_1^{\dagger}a_2^{\dagger}a_4a_3 + a_3^{\dagger}a_4^{\dagger}a_2a_1) + h_{1243}(a_1^{\dagger}a_2^{\dagger}a_3 + a_3^{\dagger}a_4^{\dagger}a_1) + h_{1243}(a_1^{\dagger}a_2^{\dagger}a_1a_2 + a_3^{\dagger}a_1^{\dagger}a_2^{\dagger}a_1) + h_{1243}(a_1^{\dagger}a_1^$

Todos los elementos de matriz tienen una dependencia en la distancia interatómica.

Variational Quantum Eigensolver (VQE)

El VQE, presentado por primera vez en [5], es un tipo de VQA el cual consiste en encontrar una parametrización adecuada de $|\psi
angle$ tal que el valor esperado del hamiltoniano sea minimizado.

Para esto último hay que expresar el hamiltoniano en términos de Pauli y a $|\psi
angle$ como la aplicación de alguna matriz unitaria parametrizada U(heta) . El problema de optimización de VQE es entonces

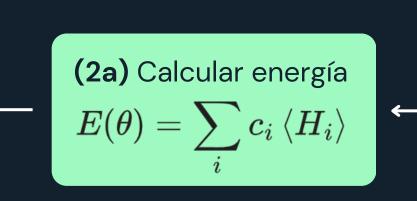
$$E_{ ext{VQE}} = \min_{ heta} raket{\mathbf{0}|U^\dagger(heta)\,\mathcal{H}\,U(heta)|\mathbf{0}}$$

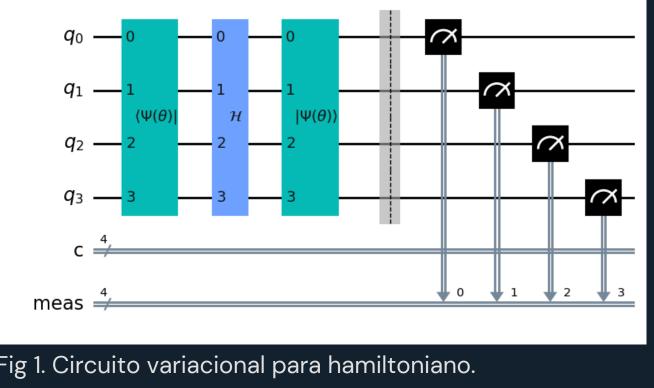
donde $heta\in (-\pi,\pi]$ y $|{f 0}
angle=|0
angle^{\otimes N}$, el registro inicial de los qubits. Esta última expresión suele conocerse como función de costo.

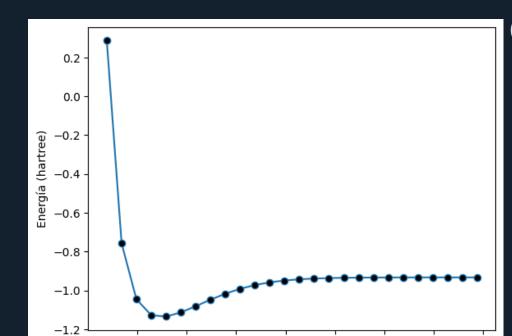
(1a) Inicialización de qubits $|\mathbf{0} angle = |0 angle_1 |0 angle_2 \cdots |0 angle_N$

(1b) Ansatz de circuito $|\psi(heta)
angle = U(heta)\,|\mathbf{0}
angle$ (1c) Medición $\langle H_i
angle = \langle \psi(heta) | H_i | \psi(heta)
angle$

(2b) Ajustar θ para aproximar $E(\theta)$ $\min E(\theta)$







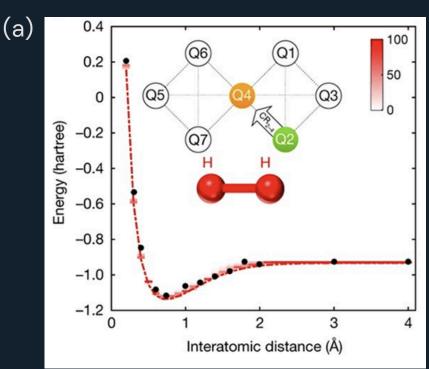
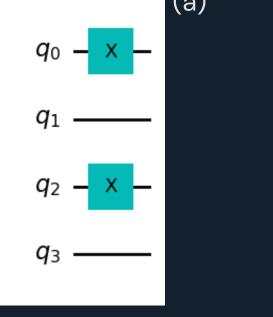


Fig 1. Circuito variacional para hamiltoniano.

Fig 2. Energía del estado base de la molécula de hidrógeno. (a) Simulación obtenida con Qiskit. (b) Resultados computacionales/experimentales obtenidos en [2].



Valor esperado

Un observable $\,O\,$ tendrá como valor esperado a

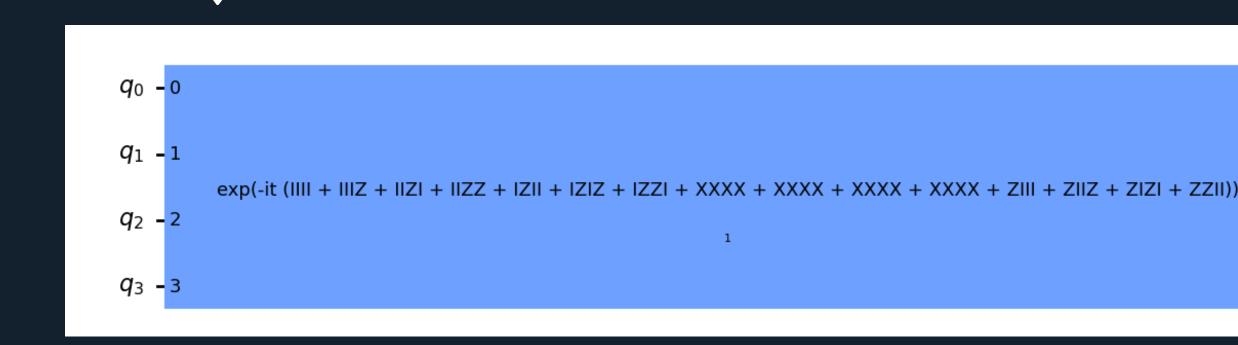


Fig 3. Representación gráfica de las partes del circuito cuántico en fig 1. (a) Función de onda. (b) Hamiltoniano molecular.

 $\langle O
angle = 2 ||O|| \, \langle ilde{O}
angle - ||O||$

donde $\langle ilde{O}
angle = {
m Tr}(ilde{O}
ho(t))$ con $ilde{O} = rac{O + I||O||}{2||O||}$, el cual puede ser reescrito como una descomposición de

 $\langle L^\dagger | \phi_{ik}(t)
angle = L^\dagger M_k v_i
ightarrow U_{L^\dagger} U_{M_k} (v_i^T, 0, \cdots, 0)^T$

Preparación del sistema

SISTEMAS ABIERTOS

Se busca simular un sistema dinámico representado por

Análogo al caso para sistemas cerrados, se reescribirá a $|\phi_i\rangle$ de manera conveniente. Aquí $|\phi_i
angle$ se escribirá en términos de un vector inicial v_i .

$$|\phi_{ik}(t)
angle = M_k v_i o U_{M_k}(v_i^T,0,\cdots,0)^T; \hspace{0.5cm} U_{M_k} = egin{pmatrix} M_k & D_{M_k}^\dagger \ D_{M_k} & -M_k^\dagger \end{pmatrix}$$

 $ho(t) = \sum M_k
ho M_k^\dagger$; $ho = \sum p_i \ket{\phi_i} ra{\phi_i}$

con ho el estado inicial, M_k los operadores de Kraus y p_i la probabilidad de medir $|\phi_i\rangle$.

donde $\,U_{M_k}$ es la 1-dilatación de $\,M_k\,$ y $\,D_{M_k}=\sqrt{I-M_k^\dagger M_k}\,$ es el operador de defecto de M_k .



Población de estados

La probabilidad de cada uno de los estados base puede ser recuperado mediante el vector diagonal:

$$\mathrm{diag}(
ho(t)) = \sum_{ik} p_i \cdot \mathrm{diag}(|\phi_{ik}
angle \langle \phi_{ik}|)$$

Aquí $\operatorname{diag}(|\phi_{ik}(t)\rangle\langle\phi_{ik}(t)|)=(|c_{ik1}|^2,|c_{ik2}|^2,\ldots,|c_{ikn}|)^T$ donde $|c_{ikj}|^2$ es el elemento de la diagonal de $|\phi_{ik}(t)\rangle\langle\phi_{ik}(t)|$ al proyectar sobre la j-ésima entrada.

Conclusión

Cholesky, $ilde{O} = LL^{\dagger}$.

Aquí L^{\dagger} evoluciona como

Este trabajo ha desglosado a detalle el funcionamiento del VQE, una simulación empleando el método y la extensión de un análogo de este para los sistemas cuánticos abiertos. Si bien este trabajo recrea resultados ya existentes, sienta las bases para futuras investigaciones sobre cómo se puede adaptar el VQE para abordar las complejidades introducidas por las interacciones ambientales. Asimismo, evaluar su rendimiento en comparación con enfoques clásicos y explorar su aplicabilidad en campos como la química cuántica y la ciencia de los materiales.

Referencias

[1] Cerezo, M., Arrasmith, A., Babbush, R. et al. Variational quantum algorithms. Nat Rev Phys 3, 625–644 (2021). [2] Kandala, A., Mezzacapo, A., Temme, K. et al. Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets. Nature 549, 242–246 (2017). [3] Hu, Z., Xia, R. and Kais, S. A quantum algorithm for evolving open quantum dynamics on quantum computing devices. Sci Rep 10, 3301

(2020).[4] Szabo, A., and Ostlund, N. Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. Dover Publications, Mineola, NY, (1996).

Código