

ALGORITMOS VARIACIONALES PARA SISTEMAS ABIERTOS

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

1. Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México.
2. Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México.



SISTEMAS CERRADOS

Metodología (Simulación molecular)

1

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.

$$E_0 \leq \frac{\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$$

Aquí $\Psi = \Psi(\alpha_1, \alpha_2, \dots)$ con α_i un parámetro. La idea consiste en variar los parámetros de Ψ de modo tal que el valor de \mathcal{H} sea minimizado.

2

Representación ocupacional

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

2.1

Función de onda

$$|n_1, n_2, \dots, n_\alpha, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \mathcal{A} \bigotimes_\alpha \Psi_\alpha^{\otimes n_\alpha};$$
$$\mathcal{A} = \frac{1}{N!} \sum_\alpha (-1)^{\sigma_\alpha} \hat{P}_\alpha$$

2.2

Hamiltoniano electrónico

$$\mathcal{H} = - \sum_i \frac{\nabla_i^2}{2} - \sum_{i,A} \frac{Z_A}{r_{iA}} + \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} + \sum_{A < B} \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}}$$
$$\mathcal{H} = \sum_{pq} h_{pq} a_p^\dagger a_q + \frac{1}{2} \sum_{pqrs} g_{pqrs} a_p^\dagger a_q^\dagger a_s a_r + \frac{1}{2} h_{\text{nuc}}$$

Base mínima para hidrógeno molecular H_2

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

$$\phi_{1s}^{\text{CCF}}(\zeta = 1.24) = d_{13} \phi_{1s}^{\text{GF}}(\alpha_{13}) + d_{23} \phi_{1s}^{\text{GF}}(\alpha_{23}) + d_{33} \phi_{1s}^{\text{GF}}(\alpha_{33})$$

donde

$$\phi_{1s}^{\text{GF}}(\alpha, \mathbf{r} - \mathbf{R}_A) = \left(\frac{2\alpha}{\pi} \right)^{3/4} e^{-\alpha |\mathbf{r} - \mathbf{R}_A|^2}$$

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

Los orbitales moleculares simétrico y antisimétrico son

$$\psi_+ = \varphi_A + \varphi_B = \text{●} \quad \psi_- = \varphi_A - \varphi_B = \text{●}$$

aquí $\varphi_{A(B)}$ funciones centradas en el núcleo $A(B)$ dadas por ϕ_{1s}^{CCF} .

Con las contribuciones de espín hay cuatro espín-orbitales

$$\begin{aligned} |\chi_1\rangle &= \text{●} \blacktriangle & |\chi_2\rangle &= \text{●} \blacktriangledown \\ |\chi_3\rangle &= \text{●} \blacktriangle & |\chi_4\rangle &= \text{●} \blacktriangledown \end{aligned}$$

aquí \blacktriangle (\blacktriangledown) representa espín arriba (abajo).

Introducción

Los algoritmos cuánticos variacionales (VQAs) son cruciales para abordar problemas de optimización de energía de sistemas cuánticos planteados para computadoras cuánticas [1,2].

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

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 simulación de sistemas abiertos con VQAs.

3

Fermiones a *qubits*

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)**:

$$a_j \mapsto A_j = \left(\bigotimes_{k=0}^{j-1} Z_k \right) \frac{1}{2} (X + iY)_j$$
$$a_j^\dagger \mapsto A_j^\dagger = \left(\bigotimes_{k=1}^{j-1} Z_k \right) \frac{1}{2} (X - iY)_j$$

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

Ejemplo. Molécula de hidrógeno

Hidrógeno molecular en segunda cuantización

$$\mathcal{H} = H^{(1)} + H^{(2)}$$
$$H^{(1)} = h_{11} (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2) + h_{33} (\hat{a}_3^\dagger \hat{a}_3 + \hat{a}_4^\dagger \hat{a}_4)$$
$$H^{(2)} = h_{1221} a_1^\dagger a_2^\dagger a_2 a_1 + h_{3443} a_3^\dagger a_4^\dagger a_4 a_3 + h_{1441} a_1^\dagger a_4^\dagger a_4 a_1 + h_{2332} a_2^\dagger a_3^\dagger a_3 a_2$$
$$+ (h_{1331} - h_{1313}) a_1^\dagger a_3^\dagger a_3 a_1 + (h_{2442} - h_{2424}) a_2^\dagger a_4^\dagger a_4 a_2$$
$$+ h_{1423} (a_1^\dagger a_4^\dagger a_2 a_3 + a_3^\dagger a_2^\dagger a_4 a_1) + h_{1243} (a_1^\dagger a_2^\dagger a_4 a_3 + a_3^\dagger a_4^\dagger a_2 a_1)$$

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 $|\psi\rangle$ tal que el valor esperado del hamiltoniano sea minimizado.

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

$$E_{\text{VQE}} = \min_{\theta} \langle 0 | U^\dagger(\theta) \mathcal{H} U(\theta) | 0 \rangle$$

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

SISTEMAS ABIERTOS [2,3]

Se busca simular un sistema dinámico representado por

$$\rho(t) = \sum_k M_k \rho M_k^\dagger; \quad \rho = \sum_i p_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i|$$

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

1

Preparación del sistema

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

$$|\phi_{ik}(t)\rangle = M_k v_i \rightarrow U_{M_k}(v_i^T, 0, \dots, 0)^T; \quad U_{M_k} = \begin{pmatrix} M_k & D_{M_k}^\dagger \\ D_{M_k} & -M_k^\dagger \end{pmatrix}$$

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 .

2

Población de estados

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

$$\text{diag}(\rho(t)) = \sum_{ik} p_i \cdot \text{diag}(|\phi_{ik}\rangle \langle \phi_{ik}|)$$

Aquí $\text{diag}(|\phi_{ik}(t)\rangle \langle \phi_{ik}(t)|) = (|c_{ik1}|^2, |c_{ik2}|^2, \dots, |c_{ikm}|^2)^T$ 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.

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).
- [5] A. Peruzzo, J. McClean, P. Shadbolt, et al. A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor. Nat Commun 5, 4213 (2014).

Código



Conclusión

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.