

Simulación digital de Hamiltonianos en una computadora cuántica

Posgrado en Ciencias Físicas

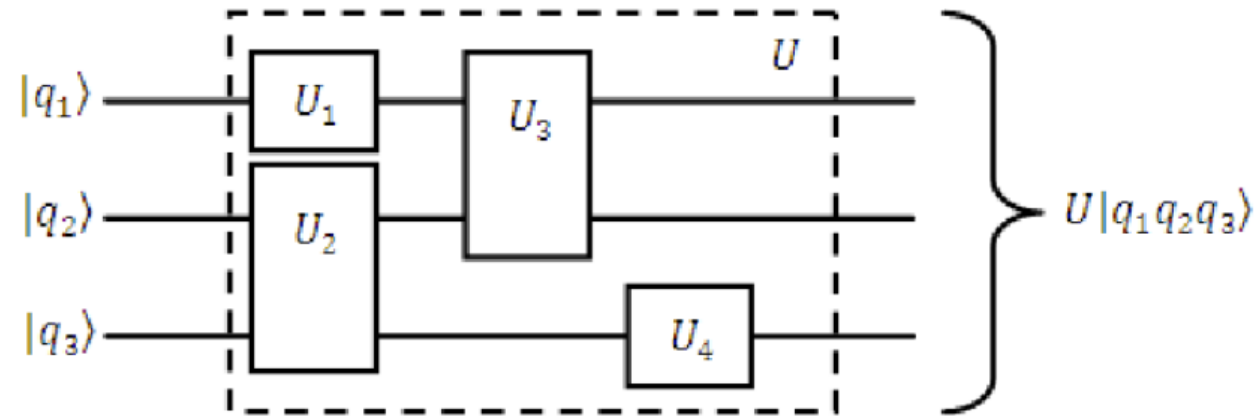
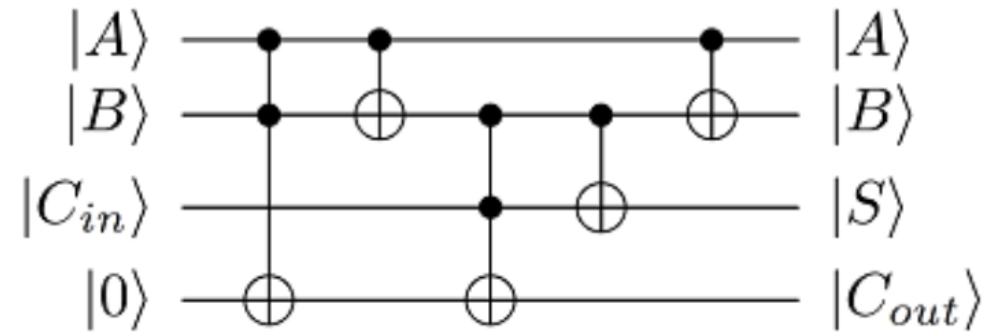
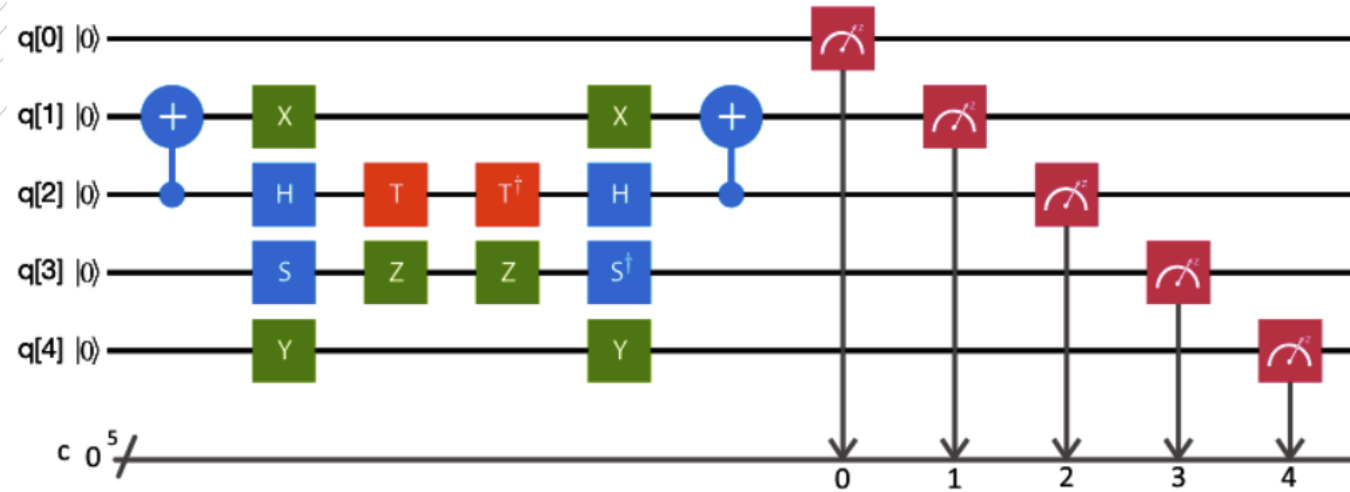
**Proyecto de investigación
Miguel de Jesús González Martínez**

24/01/2022

Contenido

- **Computadoras cuánticas como simuladores digitales**
- **Simulación cuántica digital**
- **Trotterización**
- **Caos en sistemas pateados**

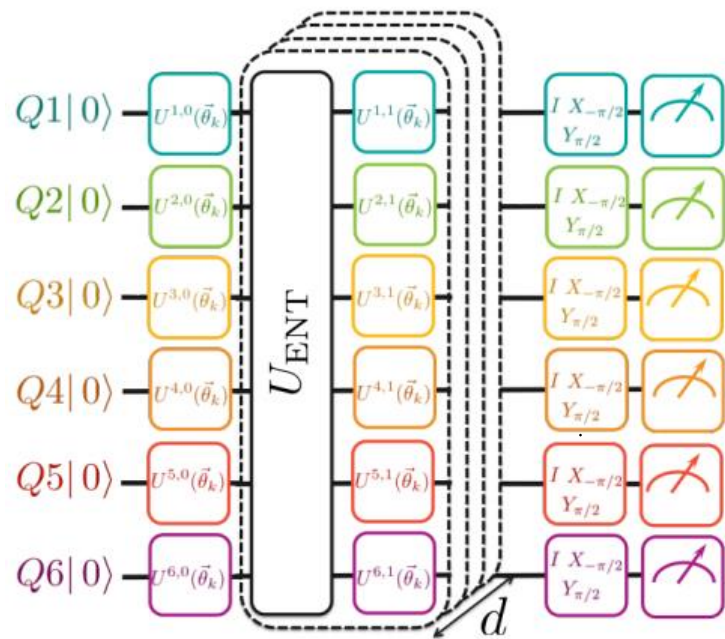
Computadora cuántica



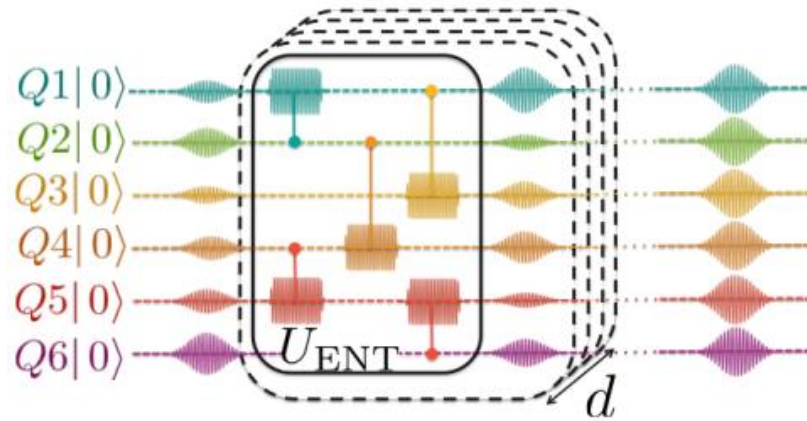
Computadora cuántica

Modelo de circuito

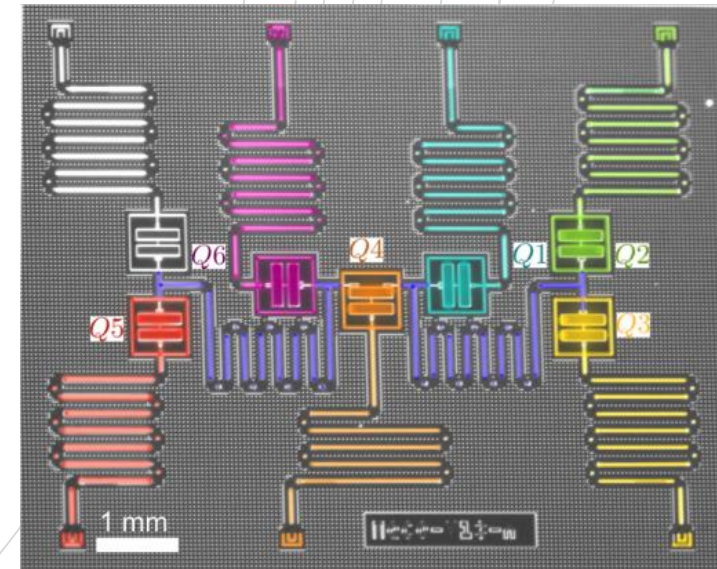
1



2



3



Simulación de un Hamiltoniano

1. Relevancia

Los modelos a simular tienen que ser relevantes para algún área en particular (materia condensada, física de altas energías, química cuántica).

2. Control

El simulador deberá contar con un amplio control en los parámetros del modelo a estudiar.

3. Confianza

La física observada en el simulador tiene que corresponder de manera fiel al modelo ideal bajo cierto rango controlado de error.

4. Eficiencia

El simulador cuántico tiene que resolver de manera más eficiente (tiempo y recursos) cierto problema de lo que una computadora clásica podría hacerlo.

Simulación analógica

- Es un sistema cuyo Hamiltoniano representa (casi) uno a uno los parámetros del Hamiltoniano a simular
- No tiene escalabilidad
- Menor rango de parámetros del modelo a simular

Simulación digital

- Es una plataforma en donde se utilizan un conjunto de compuertas en particular para simular gran cantidad de modelos
- En principio estos sistemas se diseñan para ser escalables
- Hay que considerar en mayor medida los errores

Tipo de simulaciones

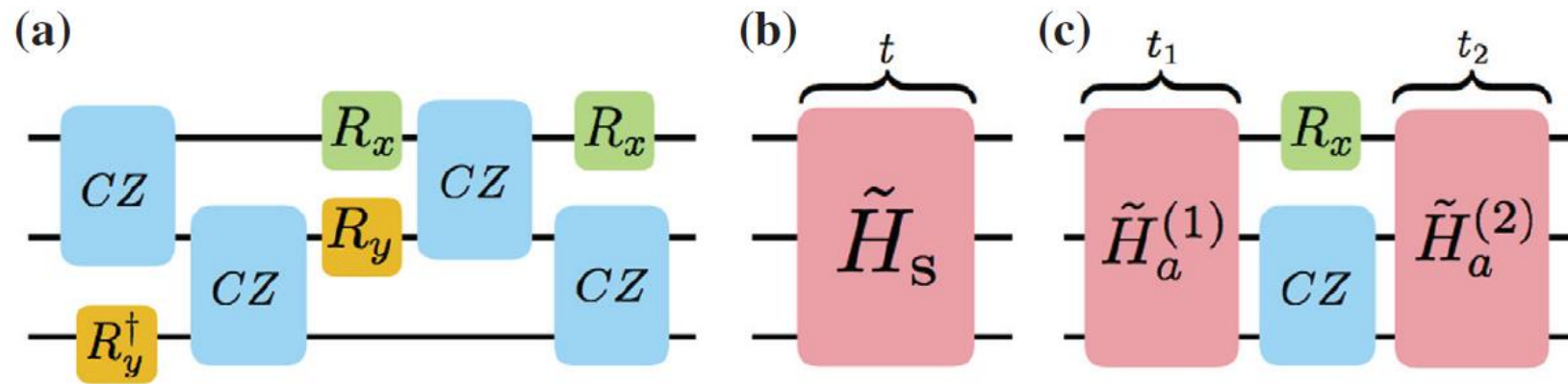


Figure 1. Examples of digital, analog and digital-analog quantum simulation protocols. (a) A purely digital sequence of one and two qubit gates tries to reproduce a targeted quantum evolution with a generic Hamiltonian H_S . (b) The analog simulator uses a controllable system whose evolution \tilde{H}_S mimics almost one-to-one that of the simulated system H_S . (c) A digital-analog quantum simulator combines analog blocks $\tilde{H}_a^{(i)}$ that naturally appear in the simulator with digital gates, e.g. entangling CZ-gates.

Trotterización

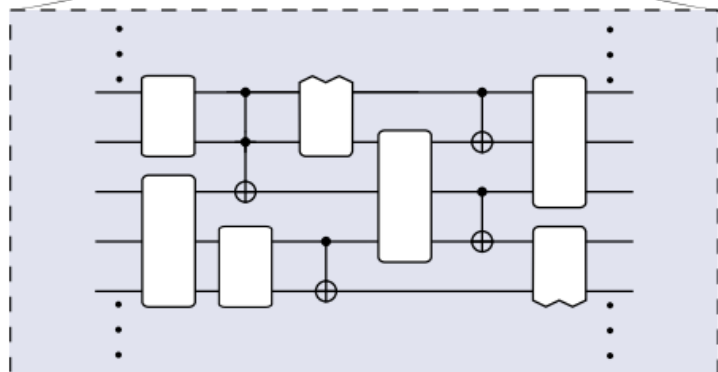
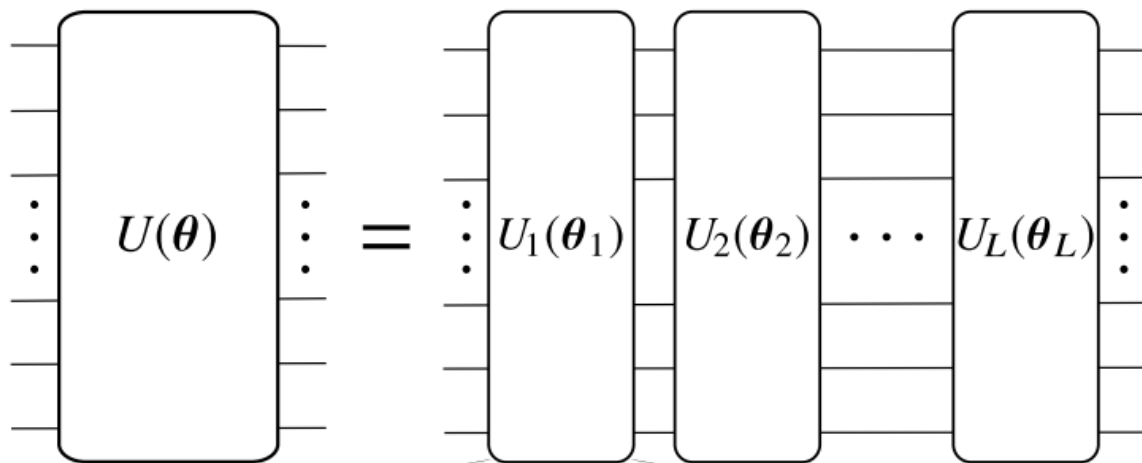
Una manera de aproximar la evolución temporal de un Hamiltoniano de forma que sea más factible de implementarlo es a través de la Trotterización. Esta aproximación consiste en discretizar la evolución continua con la ventaja de obtener una expresión que involucre operadores que actúen sobre partes más pequeñas de un sistema dado.

Es decir, en vez de obtener un solo operador de evolución unitaria (o compuerta en el lenguaje de computación cuántica) que actúe sobre todo el sistema, se obtiene una serie de operadores que actúan sobre partes más pequeñas [14].

$$\hat{H} = \sum_k \hat{h}_k$$

$$\exp\left[\frac{-i\tau}{\hbar}\hat{H}\right] = \left(\exp\left[\frac{-i}{\hbar}\hat{H}\frac{\tau}{n}\right]\right)^n = \left(\exp\left[\frac{-i}{\hbar}\sum_k \hat{h}_k\frac{\tau}{n}\right]\right)^n = \left(\prod_k \exp\left[\frac{-i\tau}{n\hbar}\hat{h}_k\right]\right)^n + O(\tau^2/n^2)$$

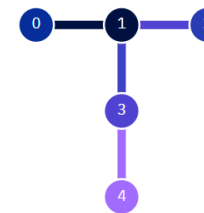
Trotterización



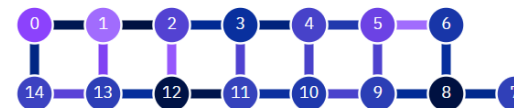
Circuito cuántico de un operador unitario utilizado en algoritmos variacionales.



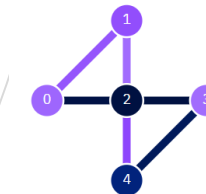
`ibmq_Santiago`



`ibmq_Valencia`



`ibmq_16_melbourne`



`ibmq_5_yorktown`

Arquitectura de algunas computadoras cuánticas implementadas en circuitos superconductores de IBM. Figura tomada de qiskit.org.

El modelo LMG

El modelo de Lipkin-Meshkov-Glick consiste en la descripción de las excitaciones colectivas de un sistema de N qubits de espín $\frac{1}{2}$ que interactúan a pares. Este modelo puede escribirse con los operadores de momento angular definidos anteriormente y está dado por la siguiente expresión [8]:

$$\hat{H}_L = \Omega \hat{J}_z + \frac{\epsilon}{J} \hat{J}_x^2$$

De igual forma, al tomar el valor esperado del Hamiltoniano cuántico de Lipkin respecto a los estados coherentes atómicos, se obtiene el Hamiltoniano clásico de Lipkin dado por [8]:

$$H_L(Q, P) = \frac{\Omega}{2}(Q^2 + P^2) - \Omega + \epsilon \left(Q^2 - \frac{Q^2 P^2}{4} - \frac{Q^4}{4} \right)$$

$$\{Q(t), P\} \propto e^{\lambda t}$$

Sin embargo, el modelo de Lipkin presenta una dinámica regular, excepto en su punto inestable ($Q=P=0$) donde se puede encontrar un exponente de Lyapunov positivo.

Trotterizando el modelo LMG

Para un periodo, la matriz de evolución temporal del modelo LMG trotterizado está dada por:

$$\hat{U}(t) = e^{\frac{-it\epsilon}{J} \hat{J}_x^2} e^{-it\hat{J}_z}$$

Sistemas pateados y teoría de Floquet

De manera general, el Hamiltoniano del trompo pateado puede verse como

$$\hat{H} = \alpha\hat{H}_0 + \beta\hat{H}_1 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(t - n\tau), \quad [\hat{H}_0, \hat{H}_1] \neq 0$$

Entonces, utilizando el teorema de Floquet el vector de estado al tiempo $t = n\tau$ está dado por:

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}^n(\tau)|\Psi(0)\rangle$$

$$\hat{U}(\tau) = \exp[-i\beta\hat{H}_1]\exp[-i\alpha\tau\hat{H}_0]$$

El trompo pateado cuántico (quantum kicked top model)

En su versión cuántica, el Hamiltoniano del trompo pateado viene dado por la siguiente expresión:

$$\hat{H} = \frac{p}{\tau} \hat{J}_y + \frac{k}{2J} \hat{J}_z^2 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(t - n\tau) \quad \hat{J}_i \equiv \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \hat{\sigma}_i^n$$

Para recuperar el Hamiltoniano clásico, se puede tomar el valor esperado del Hamiltoniano anterior en el límite $J \rightarrow \infty$ respecto a los estados coherentes atómicos dados por:

$$|z\rangle \equiv \frac{1}{(1 + |z|^2)^J} e^{z\hat{J}_+} |J, -J\rangle \quad z = (Q - iP) / \sqrt{4 - (Q^2 + P^2)}$$

Diferencia entre el quantum kicked top and quantum rotor

$$\left\{ \begin{array}{l} H_{\text{R}} = \frac{1}{2I} p^2 + k \cos \phi \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(t - n), \\ H_{\text{T}} = \frac{\tau}{2\hbar j} J_z^2 + \alpha J_x \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(t - n), \end{array} \right. \quad [p, \phi] = \hbar/i \quad \text{and} \quad [J_i, J_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_k$$

$$\left\{ \begin{array}{l} U_{\text{R}} = \exp[-ip^2/2I\hbar] \exp[-i(k/\hbar) \cos \phi], \\ U_{\text{T}} = \exp[-i\tau J_z^2/2\hbar j] \exp[-i\alpha J_x/\hbar]. \end{array} \right.$$

El trompo pateado clásico

Usando las ecuaciones de Hamilton se obtiene el siguiente mapeo $\vec{S}_{n+1} = F\vec{S}_n$ eligiendo $p = \pi/2$, para el vector normalizado $\vec{S} \equiv \vec{J}/J$:

$$\begin{aligned}S_{x_{n+1}} &= S_{z_n} \cos(kS_{x_n}) + S_{y_n} \sin(kS_{x_n}), \\S_{y_{n+1}} &= S_{y_n} \cos(kS_{x_n}) - S_{z_n} \sin(kS_{x_n}), \\S_{z_{n+1}} &= -S_{x_n},\end{aligned}$$

Muchas de las propiedades a analizar del sistema, se reducen al análisis del mapeo dado por la siguiente expresión:

$$F = \begin{pmatrix} 0 & \sin(kS_x) & \cos(kS_x) \\ 0 & \cos(kS_x) & -\sin(kS_x) \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

El trompo pateado clásico

Ahora, al realizar un cambio de variables de (S_x, S_y, S_z) a (Q, P) a través de la siguiente transformación canónica, las secciones de Poincaré se ven de la siguiente manera:

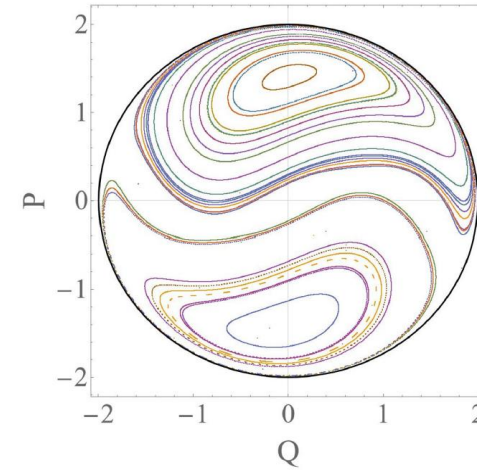
$$Q \equiv \frac{\sqrt{2}S_x}{\sqrt{1-S_z}},$$

$$P \equiv \frac{-\sqrt{2}S_y}{\sqrt{1-S_z}}.$$

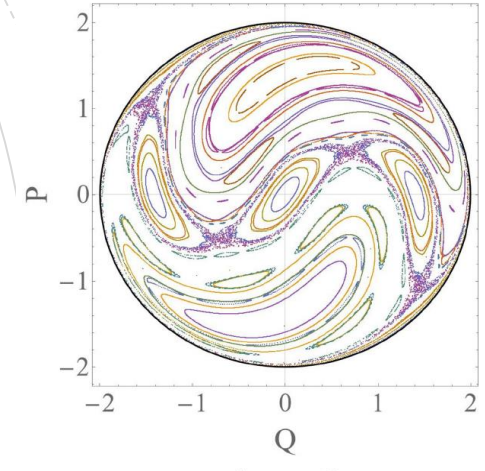
$$S_x = Q\sqrt{1 - \frac{Q^2 + P^2}{4}},$$

$$S_y = -P\sqrt{1 - \frac{Q^2 + P^2}{4}},$$

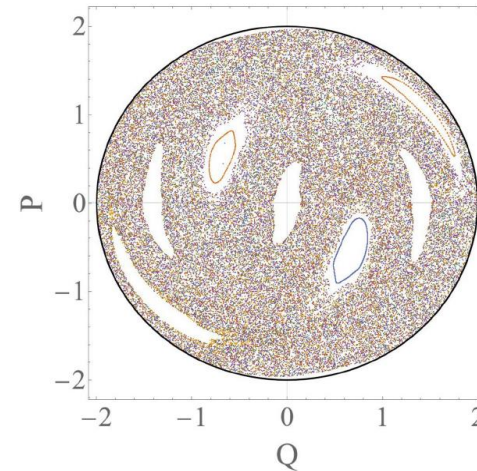
$$S_z = \frac{Q^2 + P^2}{2} - 1.$$



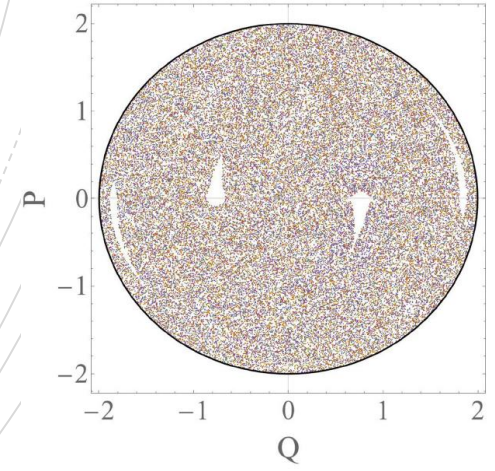
$k = 1$



$k = 2$



$k = 3$



$k = 4$

El trompo pateado clásico

Los exponentes de Lyapunov λ_i para un mapeo m dimensional $\vec{X}_{n+1} = F(\vec{X}_n)$ están definidos como [6]:

$$\lambda_i = \ln \left[\lim_{N \rightarrow \infty} |j_i(N)|^{1/N} \right], \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (6.1)$$

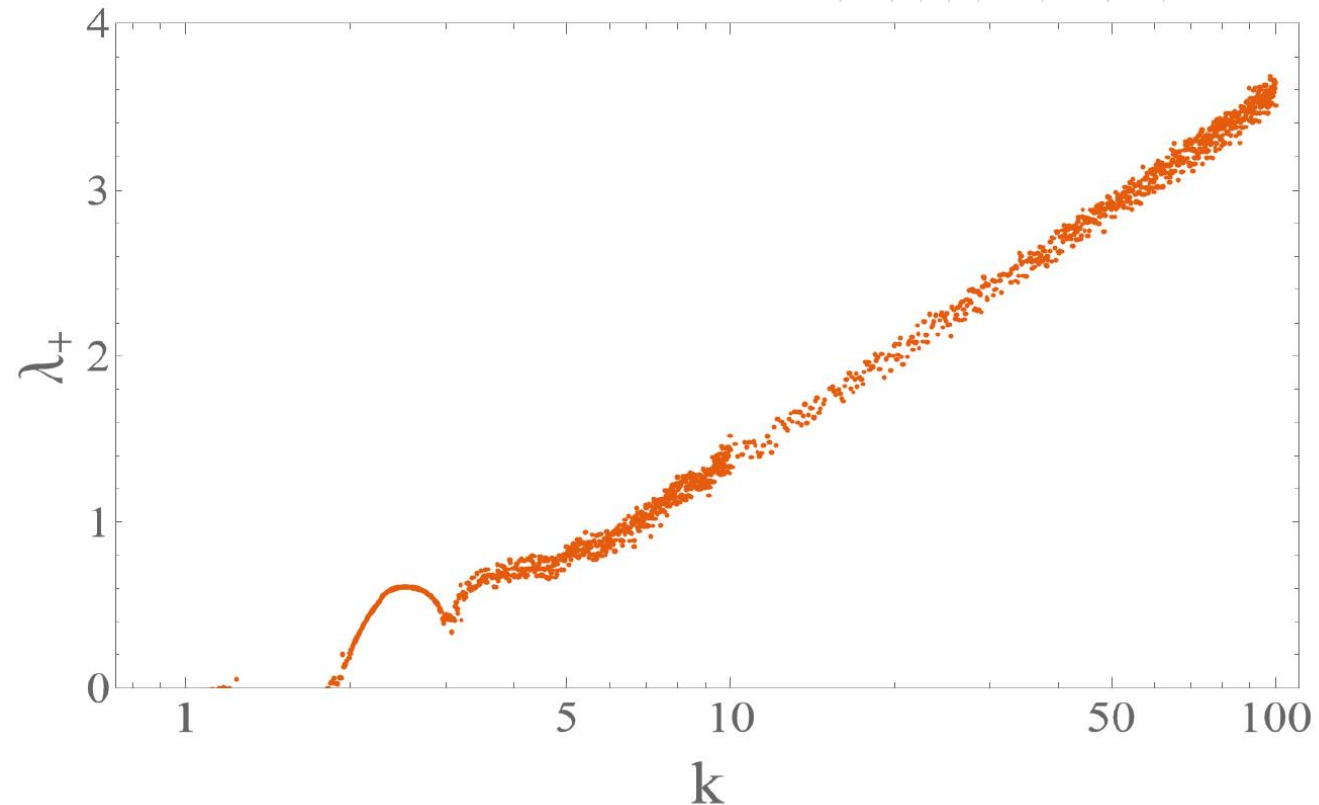
en donde j_i es el eigenvector de la matriz dada por:

$$J_N = J(\vec{X}_N)J(\vec{X}_{N-1})\dots J(\vec{X}_1) \quad (6.2)$$

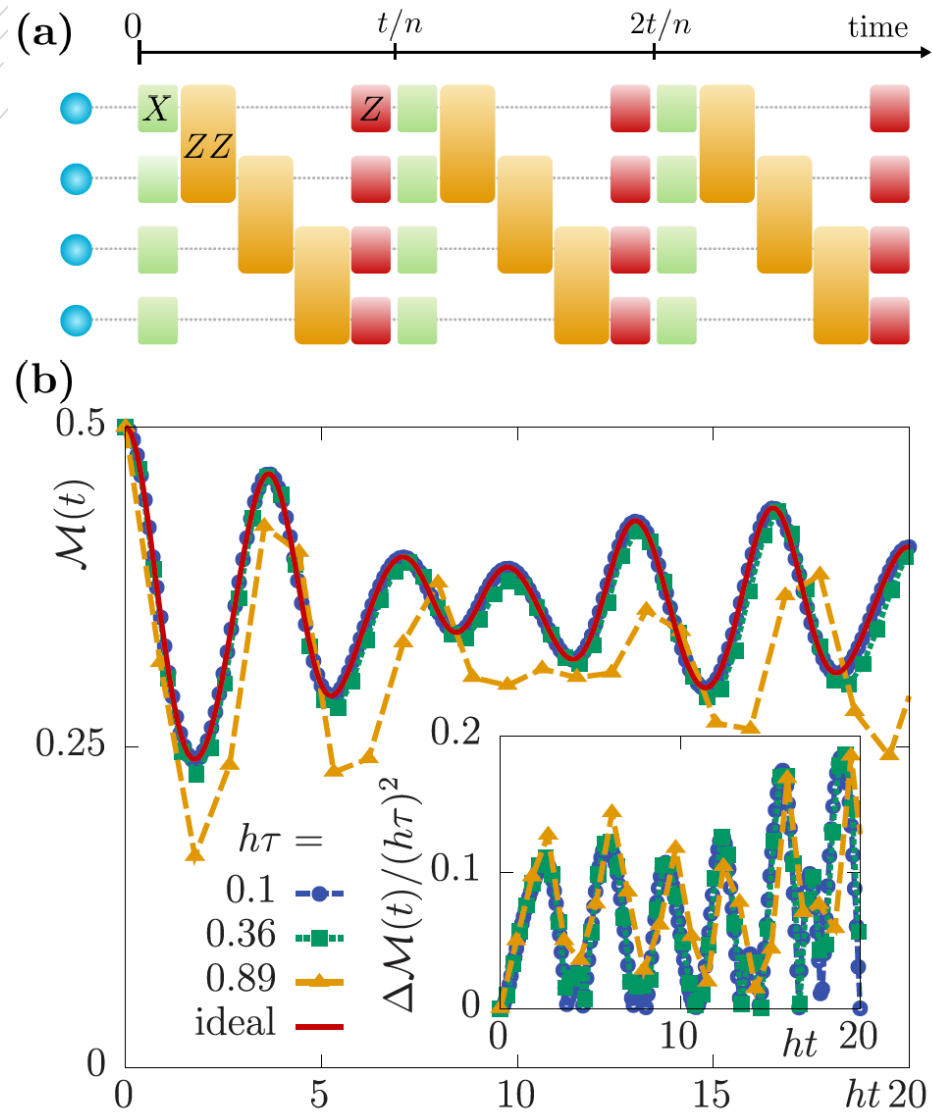
de la cual, cada matriz J está dada por:

$$J(\vec{X}) = (\partial \vec{F} / \partial \vec{X}) \quad (6.3)$$

En la figura se muestra el máximo exponente de Lyapunov en función del parámetro k para el trompo pateado, usando $p = \pi/2$ y $N = 1000$ patadas



Resultados de la literatura



Modelo de Ising

$$H = H_Z + H_X,$$

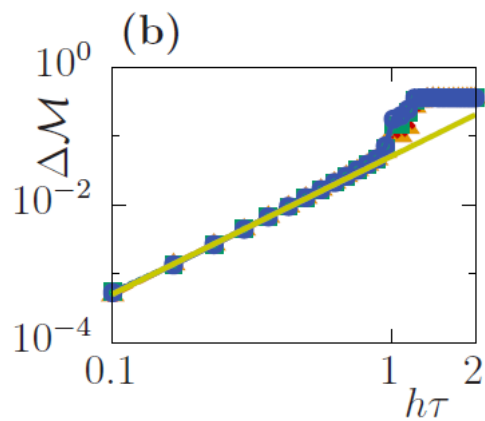
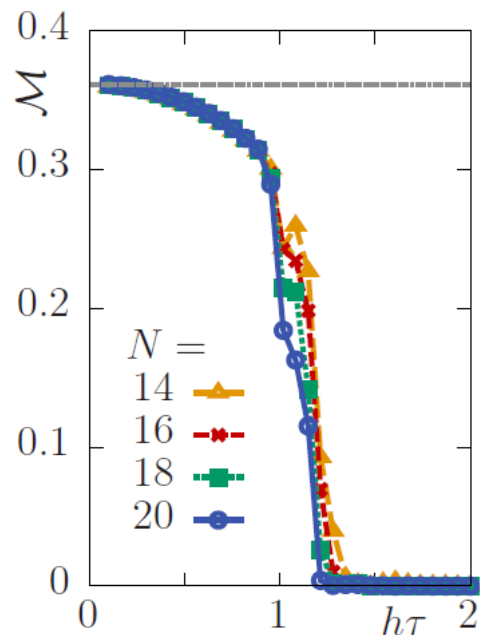
where

$$H_Z = J \sum_{l=1}^{N-1} S_l^z S_{l+1}^z + h \sum_{l=1}^N S_l^z, \quad H_X = g \sum_{l=1}^N S_l^x.$$

Figure 1: **Trotterized time evolution and resulting error on local observables.** (a) Gate sequence for the digital quantum simulation (DQS) of an Ising model. The desired evolution up to total simulation time t is split into n repeated sequences of length $\tau = t/n$, each decomposed into fundamental quantum gates. The example shows a gate sequence for a 4-qubit chain with Ising spin–spin interactions (ZZ) and transverse and longitudinal fields (simulated by single-qubit operations along the X and Z directions on the Bloch sphere). (b) Magnetization dynamics $\mathcal{M}(t) = N^{-1} \sum_{l=1}^N \langle S_l^z(t) \rangle$ in the DQS of the Ising model for $N = 20$ spins and different Trotter step sizes τ compared to the exact solution. The normalized deviation $\Delta\mathcal{M}(t)/(h\tau)^2$ with $\Delta\mathcal{M}(t) = |\mathcal{M}_{\tau=0}(t) - \mathcal{M}(t)|$ from the ideal dynamics $\mathcal{M}_{\tau=0}(t)$ shows a collapse of the error dynamics for sufficiently small τ .

Resultados de la literatura

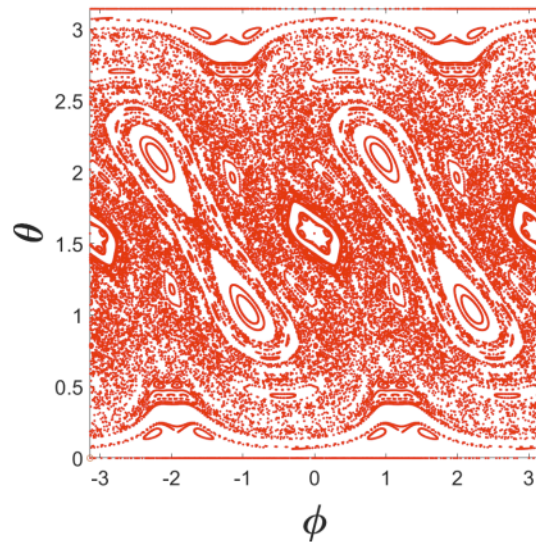
Modelo de Ising



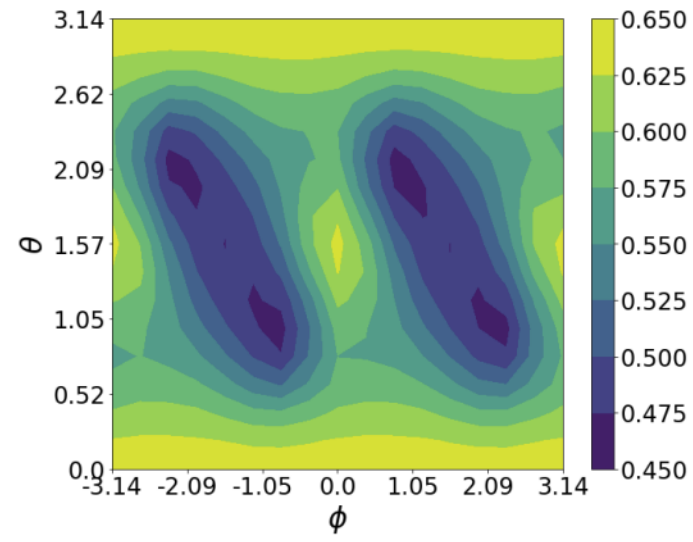
Resultados de la literatura

Concurrencia en el kicked top

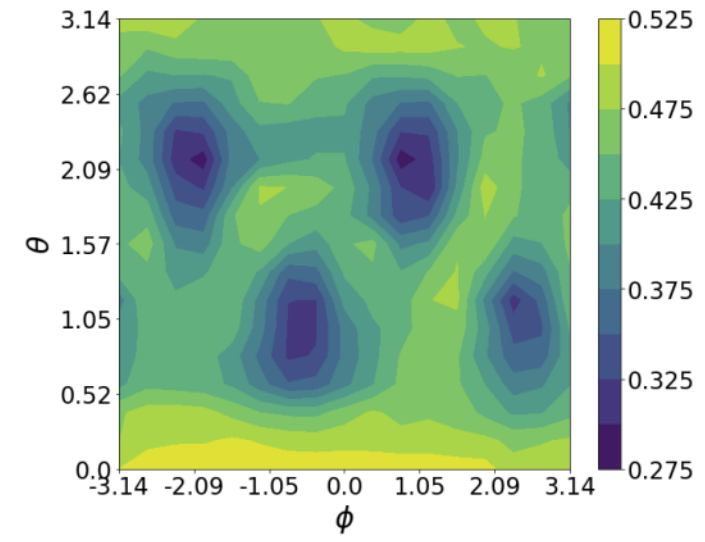
$$C = \max(0, \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_3} - \sqrt{\lambda_4})$$



(a)



(b)



(c)

Figure 6: (a) Stroboscopic map, (b) average concurrence over 200 kicks on IBMQ simulator and (c) average concurrence over 50 kicks on IBMQ *vigo* for 289 initial points and $\kappa = 2.5$.

Resultados de la literatura

OTOC en el modelo de Ising

$$C(t) = \frac{1}{\mathcal{D}} \text{tr} \left(\left| [W(t), V] \right|^2 \right)$$

$$V = e^{-i\varphi S_z} \quad W = S_z - a$$

$$H_x = h_x \sum_{i=1}^N S_i^x, \quad H_z = J_{z,\alpha} \sum_{i < j=1}^N \frac{S_i^z S_j^z}{|i-j|^\alpha},$$

$$J_{z,\alpha} = J_z / \left(\frac{1}{N-1} \sum_{i < j=1}^N \frac{1}{|i-j|^\alpha} \right)$$

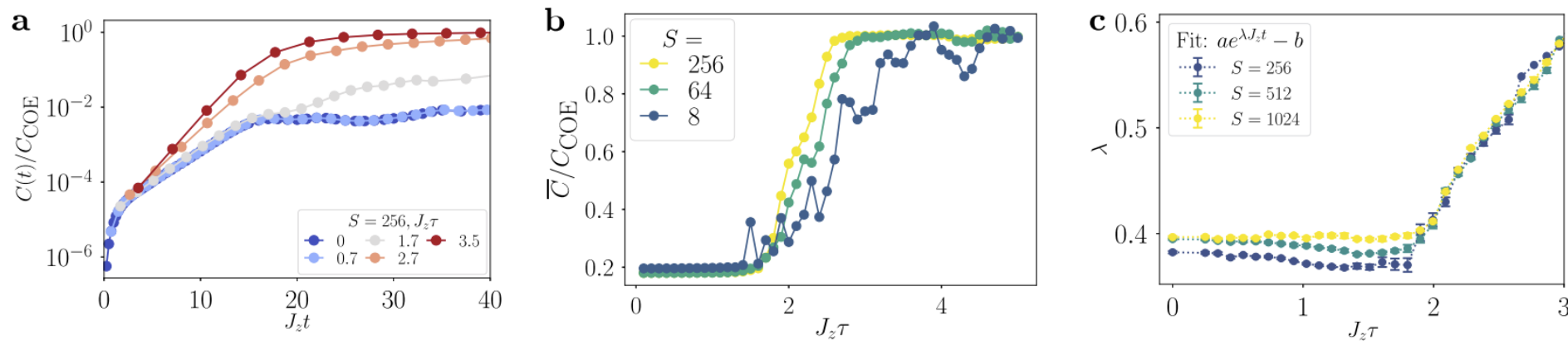


Fig. 3 Signatures of quantum chaos in OTOCs. **a** Short-time growth of the infinite-temperature OTOC Eq. (17) and **b** infinite-time average \bar{C} . In the chaotic regime, the exponential growth of $C(t)$ saturates to the COE value obtained from Eq. (25). The infinite-time average \bar{C} follows from Eqs. (26) and (27). **c** Growth rate λ for the range of times in **a** during which the OTOC grows exponentially. The rate λ is extracted from the data by a fit to $C(t) = ae^{\lambda J_z t} - b$, where a , b , and λ are fit parameters. Error bars correspond to the fitting error. In the regular regime, the growth rate takes a value that is independent of the Trotter step size τ and agrees with the value at $J_z \tau = 0$, which we obtained from the ideal evolution with the time-averaged Hamiltonian. For Trotter step sizes in the chaotic region, the growth rate increases with τ

Resultados de la literatura

- [1] Digital quantum simulation of spin models with superconducting circuits. Urtzi Las Heras. Universidad del País Vasco (2017).
- [2] Quantum time crystals. Frank Wilczek. Phys. Rev. Lett. 109, 160401 (2012). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.160401>
- [3] Observation of Time-Crystalline Eigenstate Order on a Quantum Processor. Google Quantum AI and collaborators. arXiv:2107.13571 (2021). <https://arxiv.org/pdf/2107.13571.pdf>
- [4] Classical and quantum chaos for a kicked top. Haake, F., Ku's, M., Scharf, R. Z. Physik B - Condensed Matter 65, 381–395 (1987). <https://doi.org/10.1007/BF01303727>
- [5] Quantum-classical correspondence and entanglement in periodically driven spin systems. Meenu Kumari. Tesis de Doctorado, University of Waterloo (2019).
- [6] Lyapunov exponents as a measure of the size of chaotic regions. Paul W. Cleary. J. Math. Phys. 30, 689 (1989). <https://doi.org/10.1063/1.528383>
- [7] Quantum chaos: spectral analysis of Floquet operators. James M. McCaw. arXiv: Mathematical Physics (2005). <https://arxiv.org/pdf/math-ph/0503032.pdf>
- [8] Positive quantum Lyapunov exponents in experimental systems with a regular classical limit. Sa'ul Pilatowsky-Cameo et al. Phys. Rev. E 101, 010202(R) (2020). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.101.010202>
- [9] Ordinary differential equations with applications. Second edition. Carmen Chicone. Springer 2006.
- [10] Quantum time crystals. Frank Wilczek. Phys. Rev. Lett. 109, 160401 (2012). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.160401>
- [11] Many body physics in the NISQ era: quantum programming a discrete time crystal. Matteo Ippoliti, Kostyantyn Kechedzhi, Roderich Moessner, S.L. Sondhi, and Vedika Khemani. PRX Quantum 2, 030346 (2021). <https://doi.org/10.1103/PRXQuantum.2.030346>
- [12] Observation of a discrete time crystal. Zhang, J., Hess, P., Kyprianidis, A. et al. Nature 543, 217–220 (2017). <https://doi.org/10.1038/nature21413>
- [13] Caos en sistemas átomo-campo. Jorge Chávez Carlos. Tesis de Doctorado UNAM 2018.
- [14] Intermediate spectral theory and quantum dynamics. César R. de Oliveira. Birkhäuser Basel 2009.
- [15] Lipkin model on a quantum computer. Michael J. Cervia, A. B. Balantekin, S. N. Coppersmith, Calvin W. Johnson, Peter J. Love, C. Poole, K. Robbins, and M. Saffman. Phys. Rev. C 104, 024305 (2021). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.104.024305>
- [16] Variational Quantum Algorithms. M. Cerezo et al. arXiv:2012.09265v2.
- [17] Unifying scrambling, thermalization and entanglement through measurement of fidelity out-of-time-order correlators in the Dicke model. A.M. Rey et al. Nature Communications 10, 1581 (2019). <https://doi.org/10.1038/s41467-019-09436-y>.
- [18] Simulating physics with computers. Feynman, R.P. Int J Theor Phys 21, 467–488 (1982). <https://doi.org/10.1007/BF02650179>
- [19] Hamiltonian simulation by qubitization. Guang Hao Low, Isaac L. Chuang. arXiv:1610.06546v3