



Trabajo de Fin de Grado

# Simulación de materiales magnéticos en un ordenador cuántico

Autor:

Guillem Pérez Lleonart

Directores:

David Zueco Láinez  
Sebastián Roca Jerat

Departamento de Física de la Materia condensada  
Facultad de Ciencias  
Universidad de Zaragoza

# Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>2</b>
<b>2. VQAs (<i>Variational Quantum Algorithms</i>)</b>	<b>3</b>
2.1. QAOA ( <i>Quantum Approximate Optimization Algorithm</i> ) . . . . .	4
2.2. VQE ( <i>Variational Quantum Eigensolver</i> ) . . . . .	6
<b>3. Comparativa entre algoritmos</b>	<b>7</b>
3.1. Degeneración del fundamental . . . . .	8
3.2. QAOA . . . . .	11
3.3. VQE . . . . .	12
<b>4. Campo transversal y fenómeno de frustración</b>	<b>13</b>
4.1. Fenómeno de frustración . . . . .	13
4.2. Campo transversal . . . . .	14
4.2.1. Anillos . . . . .	15
4.2.2. Obtención del primer excitado . . . . .	16
4.2.3. <i>Ladders</i> . . . . .	17
<b>5. Modelo de ruido</b>	<b>20</b>
<b>6. Conclusiones</b>	<b>23</b>

# 1. Introducción

Existe una rama de las matemáticas que se dedica a estudiar el tiempo que le cuesta a un ordenador llegar a la solución de un problema; la teoría de la complejidad computacional. Esta teoría define el conjunto  $P$  como el conjunto de todos los problemas cuyo tiempo de resolución escala con el tamaño del problema de forma polinómica. Con tamaño de problema se puede referir por ejemplo a la cantidad de paquetes a repartir en el problema del repartidor o el tamaño de una red en el modelo de Ising. También se define el conjunto  $NP$  como el conjunto de los problemas en el que, dada una posible solución, comprobar si es válida conlleva un tiempo polinómico. Obviamente  $P$  está contenido en  $NP$ . Pero se desconoce si  $P=NP$  o solo  $P\subset NP$ . De hecho hay muchos problemas en los que el tiempo que tarda la mejor manera conocida de resolver el problema computacionalmente escala mucho más rápido que de forma polinómica con el tamaño del problema; por ejemplo exponencialmente. Esto hace que, para tamaños no muy grandes, ya sea inviable intentar resolver dichos problemas.

La computación cuántica se presenta como una posible vía para una resolución viable de muchos de estos problemas no abarcables para los ordenadores convencionales. Dicha presentación se realiza por la existencia de algoritmos cuánticos que resuelven estos problemas en tiempos razonables. El problema de estos algoritmos es que requieren un ordenador cuántico de gran escala y sin ruido. Este ordenador cuántico no existe en la actualidad, por lo que estos algoritmos se quedan de momento en el plano teórico. Los ordenadores cuánticos actuales son de mediana escala (como mucho  $\sim 10^2$ , [1]) y con la presencia de ruido, también conocidos como NISQ (*Noisy Intermediate-Scale Quantum*). Esto hace que si se quiere resolver uno de estos problemas con la tecnología actual se deba buscar una vía con las limitaciones que imponen los ordenadores NISQ. Aquí es donde entran los algoritmos variacionales cuánticos, o más comúnmente llamados VQAs. Estos algoritmos combinan los ordenadores NISQ con el *machine learning* de los ordenadores convencionales para obtener soluciones aproximadas del problema a estudiar. Pero antes de profundizar más en los VQAs, es necesario definir bien en que consiste un ordenador cuántico y como se trabaja en el papel con este.

Un ordenador cuántico es una máquina cuyo elemento fundamental es un sistema cuántico de dos estados puros. A este sistema se le llama qubit y la notación común para los dos estados es  $|0\rangle$  y  $|1\rangle$ . Ejemplos de estos sistemas son la tercera componente del espín de una partícula con espín  $1/2$  o la polarización de un fotón. Al tratarse de un sistema cuántico, un qubit no solamente puede estar en uno de sus dos estados sino que también puede estar en una superposición arbitraria de estos dos,  $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ . Un ordenador cuántico contiene  $n$  qubits que se encuentran conectados, por lo que el espacio de Hilbert de estados del ordenador tiene dimensión  $2^n$ . El estado de uno o varios qubits se puede modificar mediante lo que se llama puerta lógica cuántica. Un circuito cuántico es una sucesión de puertas lógicas que llevan al ordenador cuántico de su estado inicial al estado final deseado. En la figura 1 se representa un ejemplo de un circuito cuántico de 2 qubits, con puertas lógicas de 1 y 2 qubits.

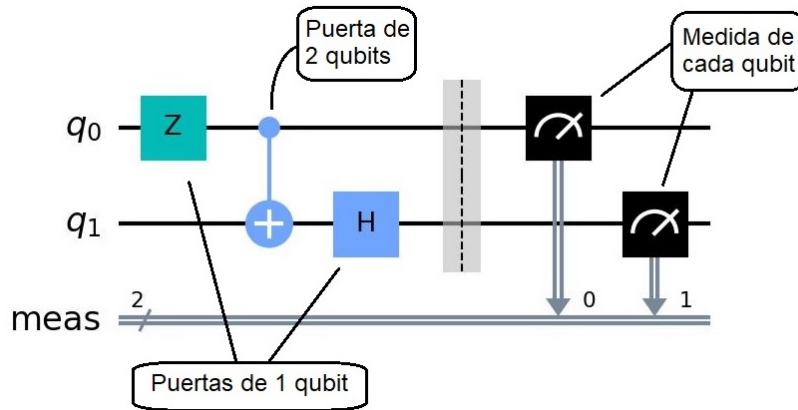


Figura 1: Ejemplo de circuito cuántico de 2 qubits.

Cada puerta tiene asociada una matriz que expresa algebraicamente como se ve modificado el o los qubits. Como es necesario que el estado posterior al aplicar una puerta esté normalizado, y el inicial también lo está, la matriz de la puerta debe mantener la norma, esto es, que sea unitaria. El circuito tiene también una matriz asociada que será el producto matricial de las matrices asociadas a las puertas que lo componen. Esta matriz será de dimensión  $2^n$  donde  $n$  es el número de qubits que usa el circuito. Es decir, un ordenador cuántico es un sistema de  $n$  sistemas cuánticos de dos niveles (qubits) que se hace evolucionar aplicando unitarias (puertas lógicas) que involucran uno o dos de estos qubits. Por lo que un circuito cuántico como el que se muestra en la figura 1 se puede entender como una evolución temporal de un estado cuántico al que se aplican unitarias.

## 2. VQAs (*Variational Quantum Algorithms*)

Como se ha mencionado anteriormente, los VQAs surgen de la necesidad de buscar soluciones a problemas que los ordenadores convencionales no pueden resolver en una cantidad de tiempo viable; pero con las condiciones técnicas que imponen los NISQ. La manera en que los VQAs abordan este tipo de problema empieza por la definición de un circuito cuántico al que se le da el nombre de *ansatz*. Este circuito depende de unos parámetros, por lo que el estado que se obtenga al ejecutar el circuito estará parametrizado. Definiendo una función coste que dependa del estado obtenido del circuito, se puede aplicar las herramientas de optimización de los ordenadores convencionales sobre dicha función. La función coste debe contener la información del problema y tener como mínimo absoluto la solución. Lo que se conoce como profundidad de un circuito cuántico, esto es, su longitud, influye significativamente en cuánto le afecta el ruido. La manera de funcionar de los VQAs hace que su profundidad sea mucho menor que la de los algoritmos cuánticos diseñados para ordenadores cuánticos de gran escala y sin ruido. De esta manera se evita gran parte del ruido. Las herramientas de optimización mencionadas son de carácter variacional. Esto implica, entre otras cosas, que nada nos asegura que la solución obtenida sea el mínimo absoluto de la función coste. Esto nos obliga a tener que conformarnos con una solución que consideremos aceptable, lo cual suele ser suficiente. No hay que olvidar que la famosa tecnología de *machine learning* usa las mismas herramientas de optimización.

Lo que varía de un VQA a otro es el *ansatz*, es decir el circuito cuántico parametrizado. Existen muchas propuestas de VQAs con sus respectivos *ansatz*. En este trabajo se ha visto el QAOA (*Quantum Approximate Optimization Algorithm*) y el VQE (*Variational Quantum Eigensolver*). El primero tiene relación con el sistema de estudio puesto que el *ansatz* depende

del Hamiltoniano del sistema. Mientras que en el segundo, la única dependencia que presenta con el sistema es el tamaño de este por el número de qubits a utilizar. Algo que tienen en común es que el *ansatz* de cada uno se forma a partir de un bloque fundamental que se puede concatenar varias veces consigo mismo. De esta manera, llamaremos número de capas  $l$ , a la cantidad de iteraciones que tiene el circuito de este bloque fundamental. Y, en las simulaciones realizadas una dependencia a estudiar es respecto a este número de capas. Aún así, es importante que  $l$  no tenga un valor muy elevado, dado que eso aumentaría la profundidad del *ansatz* y por ende la cantidad de ruido. Por esto mismo, todos los análisis han sido realizados en el intervalo de  $l = [1, 6]$ .

## 2.1. QAOA (*Quantum Approximate Optimization Algorithm*)

El QAOA apareció en 2014 [2] como una propuesta de algoritmo cuántico que permitiera resolver problemas clásicos caracterizados por soluciones que pudieran representarse como estados producto. Es decir, 0s y 1s. Para ello se mapea el problema original a un Hamiltoniano tipo Ising. Un ejemplo lo constituye el problema de *Maximum cut* o *Max-Cut* [2], en el cual se trata de trazar un corte de la máxima longitud posible que separe zonas diferenciadas en un grafo caracterizadas por alguna propiedad binaria. El grafo puede *mapearse* a una red de espines  $1/2$  cuya topología vendrá dada por las conexiones entre los distintos nodos del grafo. La solución corresponderá al estado fundamental de dicho Hamiltoniano (configuración que minimiza la energía) que será un estado producto con cada espín en una de las dos polarizaciones posibles (equivalente a las dos configuraciones posibles de cada nodo en el problema inicial).

Veamos como se construye el *ansatz* de este algoritmo. El estado inicial por defecto en el simulador es el  $|00\dots 0\rangle$ , es decir, todos los *qubits* inicializados en su estado fundamental. En el QAOA el estado inicial,  $|\psi_0\rangle$ , suele ser la suma uniforme de los elementos de la base propiamente normalizado. Esto es la superposición uniforme de todos los estados de la base. Se puede expresar como el producto tensorial

$$|\psi_0\rangle = \bigotimes_{i=0}^{2^n-1} \left( \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \right).$$

Este estado se consigue aplicando la puerta hadamard sobre cada uno de los qubits. Esta puerta de un qubit tiene la representación matricial  $H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ .

Como se ha mencionado anteriormente, en este algoritmo se usa el Hamiltoniano del sistema que se suele llamar Hamiltoniano problema. La manera de implementar este Hamiltoniano al circuito es mediante la unitaria  $U(\mathcal{H}_P) = e^{-i\gamma\mathcal{H}_P}$ . Además de este, el algoritmo usa un Hamiltoniano que se llama de mezcla que se define como  $\mathcal{H}_B = \sum_{i=1}^n \sigma_i^x$ ; y lo implementa de forma análoga al anterior mediante la unitaria  $U(\mathcal{H}_B) = e^{-i\beta\mathcal{H}_B}$ . Cada bloque está compuesto por una unitaria del Hamiltoniano mezcla seguida de una unitaria del Hamiltoniano problema. De esta manera, se van alternando una de cada cuando se aplican varias capas. Como su nombre indica, la función del Hamiltoniano mezcla es ir superponiendo estados. Los parámetros a optimizar son los conjuntos de  $\{\gamma_i\}_{i=1\dots l}$  y  $\{\beta_i\}_{i=1\dots l}$ . De esta manera, el estado final será  $|\psi(\{\beta_i, \gamma_i\})\rangle = U(\beta_l)U(\gamma_l)\dots U(\beta_1)U(\gamma_1)|\psi_0\rangle$ , donde  $l$  es el número de capas.

Como ejemplo de cómo resulta un circuito cuántico de QAOA, se representa en la figura 2 un caso sencillo de este con una sola capa. El sistema en el ejemplo es un triángulo con interacción a primeros vecinos (que es equivalente, en este caso, a una interacción de todos con todos), descrito por el Hamiltoniano  $\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^n \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z$ .

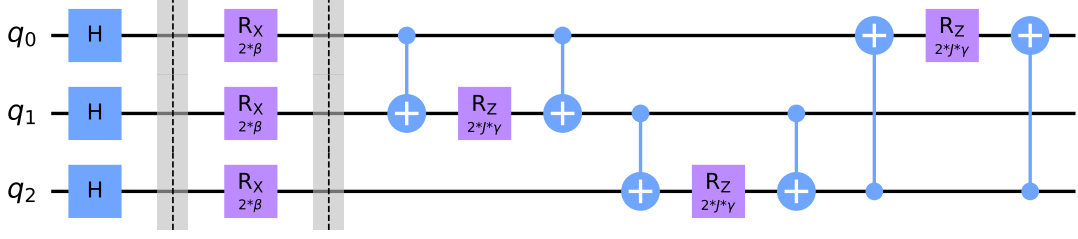


Figura 2: Circuito de QAOA con número de capas  $l = 1$  y número de qubits  $n = 3$ .

De izquierda a derecha, lo primero que hay son las puertas Hadamard, H, sobre cada qubit para establecer el estado inicial,  $|\psi_0\rangle$ . Después, hay rotaciones en el eje x con un ángulo  $2\beta$ . Estas provienen del Hamiltoniano mezcla. Sustituyendo la expresión del Hamiltoniano en su unitaria, se tiene  $U(\mathcal{H}_B) = e^{-i\beta\mathcal{H}_B} = \prod_{i=1}^n e^{-i\beta\sigma_i^x}$ . Que teniendo en cuenta que una rotación en torno al eje x de ángulo  $\theta$  es  $R_x(\theta) = e^{-i\frac{\theta}{2}\sigma^x}$ , se concluye que la unitaria del Hamiltoniano mezcla es la aplicación de rotaciones en torno al eje x con ángulo  $\theta = 2\beta$ . Finalmente, se tiene un patrón de tres puertas por cada interacción en el Hamiltoniano problema. Esta equivalencia requiere el uso de la representación matricial. Analizando el primer patrón entre el qubit 0 y el 1, se empieza calculando la unitaria del Hamiltoniano problema.  $U(\mathcal{H}_P) = e^{-i\gamma\mathcal{H}_P} = e^{i\gamma J \sum_{i=1}^n \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z} = \prod_{i=1}^n e^{i\gamma J \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z}$ . Teniendo en cuenta que

$$\sigma_i^z \sigma_{i+1}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Por lo que solo hay que hacer la exponencial de una matriz diagonal. Así la unitaria queda como

$$U(\mathcal{H}_P) = \begin{pmatrix} e^{i\gamma J} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\gamma J} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\gamma J} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\gamma J} \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Ahora se pasa a comprobar que la representación matricial de la concatenación de las tres puertas lógicas es la misma que la matriz unitaria obtenida. Estas tres puertas lógicas son dos *CNOT* y una rotación en el eje z sobre el qubit 1,  $R_z(2\gamma J) \otimes I = e^{-i\gamma J \sigma^z} \otimes I$ . Las representaciones matriciales de estas puertas lógicas son las siguientes.

$$CNOT = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} ; \quad R_z(2\gamma J) \otimes I = \begin{pmatrix} e^{-i\gamma J} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\gamma J} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\gamma J} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\gamma J} \end{pmatrix}.$$

Por lo que la representación matricial del trozo de circuito que se está analizando vendrá dado por el siguiente producto de matrices.

$$(CNOT)[R_z(2\gamma J) \otimes I](CNOT) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\gamma J} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\gamma J} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\gamma J} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\gamma J} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} e^{-i\gamma J} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\gamma J} \\ 0 & 0 & e^{i\gamma J} & 0 \\ 0 & e^{-i\gamma J} & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\gamma J} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\gamma J} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\gamma J} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\gamma J} \end{pmatrix}.$$

Que es la misma matriz obtenida en el desarrollo de la unitaria del Hamiltoniano problema  $U(\mathcal{H}_P)$ , ec. 1.

Es relevante en QAOA que los elementos en el Hamiltoniano conmuten entre sí. Esto se debe a que en operadores,  $e^{A+B} = e^A e^B$  si y sólo si  $A$  y  $B$  operadores conmutan entre sí. Es decir, que si dos términos del Hamiltoniano problema no conmutaran no se podría realizar la factorización hecha anteriormente. Si se da este caso, no quiere decir que no se pueda aplicar QAOA, existe solución a este problema (descomposición Suzuki-Trotter) pero complica el proceso de forma significativa.

## 2.2. VQE (*Variational Quantum Eigensolver*)

Se pasa ahora a comentar el algoritmo VQE. Este algoritmo surge con la intención de buscar estados fundamentales de sistemas cuánticos de muchos cuerpos [1, 3], como por ejemplo se ha investigado la aplicación en el estudio de moléculas. VQE consiste en que, partiendo del estado inicial  $|00\dots 0\rangle$ , se puede llegar al estado fundamental  $|\psi_{gs}\rangle$  mediante rotaciones. El conjunto de estas rotaciones es equivalente a aplicar su unitaria  $U$  asociada sobre el estado inicial. Es decir,  $|\psi_0\rangle = U|00\dots 0\rangle$ . Entonces, a partir de un ansatz con ciertos parámetros  $\{\theta_i\}_{i=1\dots l}$  y su respectiva unitaria  $\tilde{U}(\{\theta_i\})$ , se aplica esto sobre el estado inicial obteniendo el estado  $|\psi(\{\theta_i\})\rangle = \tilde{U}(\{\theta_i\})|00\dots 0\rangle$ . A partir de este estado se define la función  $E = \langle \psi(\{\theta_i\}) | \mathcal{H} | \psi(\{\theta_i\}) \rangle$ , que es lo que se da al optimizador clásico. En contraposición a QAOA, que sirve para encontrar estados producto; VQE permite encontrar estados superpuestos y entrelazados.

Existen varios ansatz que se aplican a este algoritmo. EL que se usa en este trabajo es el estudiado en [4]. Que, además de cumplir lo mencionado, solo se compone de puertas lógicas de un conjunto simple. Esto se hace con el propósito de evitar los problemas que conllevan los NISQ lo máximo posible. La base del bloque de este circuito consiste en aplicar rotaciones respecto al eje Y sobre cada qubit e ir mezclando los estados de los qubits con puertas CZ. Los ángulos de las rotaciones  $R_y$  son los parámetros a optimizar para obtener el estado deseado. Las puertas CZ son puertas que actúan sobre dos qubits. Lo que hacen es aplicar  $\sigma^z$  (que equivale a una rotación en z de  $\pi$  radianes) sobre el segundo qubit si en el primero el qubit tiene como valor un 1. De esta manera su representación matricial es

$$CZ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

El bloque empieza con una rotación  $R_y(\theta_i)$  sobre cada qubit. Después, aplica puertas CZ sobre las parejas de qubits (i, i+1) cuando i es un número par. Si el número total de qubits es impar, el último se deja sin emparejar. A continuación, vuelve a realizar una rotación  $R_y(\theta'_i)$  sobre cada qubit; pero esta vez no se aplica sobre los qubits de los extremos. Esto último se debe a que colocar dichas rotaciones será redundante, como se comentará un poco más adelante. Para finalizar el bloque, se aplican puertas CZ sobre las parejas de qubits (i, i+1) donde i es un número impar. Esto hace que el primer qubit esté sin emparejar y, en caso de que el número de qubits sea par, el último también. Uno podría pensar en conectar el primer qubit con el último en el caso de que el número de qubits sea par. Se ha comparado ambos casos y el hecho de conectarlos no mejora el resultado. Además, conectarlos exige una topología en la conexión de

los qubits en el ordenador cuántico más compleja. Por eso, los análisis realizados con VQE en este trabajo usan el ansatz sin esta puerta CZ adicional. Una vez se tiene la concatenación de las  $l$  capas de este bloque, se realiza al final del circuito una última línea de rotaciones  $R_y(\theta_i)$ .

Como ejemplo, en la figura 3 se representan los circuitos con  $l = 1$  y un caso con número de qubits  $n$  par y otro con  $n$  impar. Se aprecia la diferencia entre los dos casos, pero también el hecho de por qué sería redundante añadir las dos rotaciones en los qubits extremos mencionadas antes; puesto que colocar dos rotaciones seguidas sobre un mismo eje es equivalente a una rotación con la suma de los ángulos.

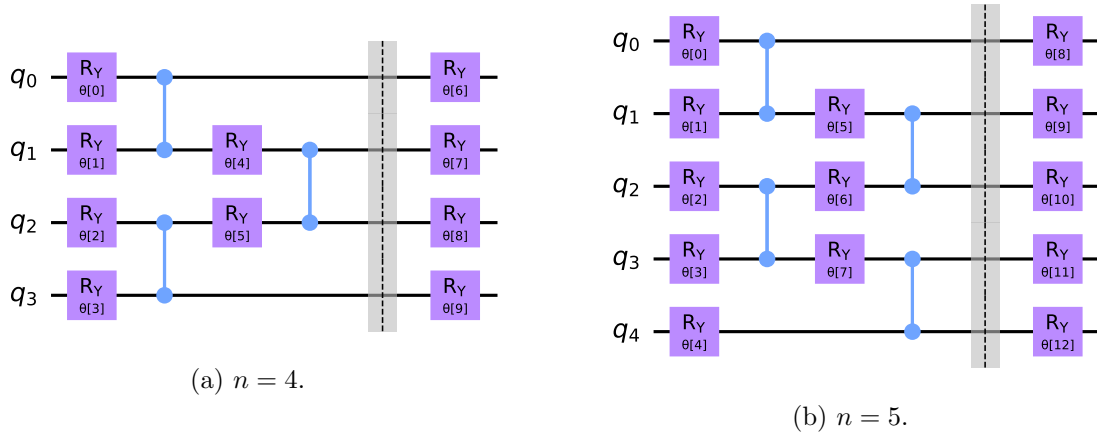


Figura 3: Circuitos de VQE con número de capas  $l = 1$  y número de qubits  $n = 4$  (a) y  $n = 5$  (b)

Algo a tener en cuenta en el diseño de estos circuitos es qué qubits interactúan con qué otros (esto es, hay puertas de más de un qubit que actúan sobre ambos). Esto es importante porque en los NISQ no todos los qubits pueden estar conectados con todos los demás. Esto es lo que se ha llamado anteriormente la topología en la conexión de los qubits. De esta manera, es importante mantener una topología sencilla. Esto explica también el por qué no añadir la puerta CZ que conecte los qubits extremos, comentada anteriormente. Añadir dicha puerta cambia la topología de una línea de  $n$  nodos a la de un anillo de  $n$  nodos. La línea es fácil de aplicar, en general, sobre cualquier topología; cogiendo los qubits más alejados entre sí del ordenador puedes aplicar cualquier línea de  $n$  nodos donde  $n$  puede variar desde 1 hasta la distancia entre estos qubits. Mientras que, un anillo de  $n$  nodos necesita que en el ordenador haya un anillo de  $n$  qubits para poder aplicarlo, y solo será válido para ese valor de  $n$ . De todos modos, esta problemática se puede resolver mediante el uso de puertas SWAP. Este tipo de puertas intercambia los estados entre dos qubits sobre los que se aplica. Concatenando las puertas SWAP necesarias, pueden conectarse qubits que físicamente no lo están. Sin embargo, todo tiene un precio: este tipo de puertas son una fuente muy importante de ruido, siendo su uso desaconsejable.

### 3. Comparativa entre algoritmos

Pasamos ahora a comparar los dos algoritmos comentados en la sección anterior. Para ello se ha realizado un análisis con ambos sobre una red con interacción a primeros vecinos, regulada por el parámetro  $J$ , y a segundos vecinos, mediada por el parámetro  $J'$ , y con campo aplicado sobre el mismo eje de la interacción, dado por el parámetro  $h$ . En este análisis se fija  $h = 1$ ; ya que a efectos prácticos para cualquier valor de  $h$  se obtiene el mismo resultado haciendo la



transformación  $(J, J', h) \rightarrow (J/h, J'/h, 1)$ . De esta manera, el hamiltoniano del sistema es

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^n \sigma_i^z - J \sum_{i=1}^n \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - J' \sum_{i=1}^n \sigma_i^z \sigma_{i+2}^z,$$

donde se supone  $\sigma_{n+1}^z \equiv \sigma_1^z$  y  $\sigma_{n+2}^z \equiv \sigma_2^z$  para simplificar la notación. Notar que la topología de la red ya ha sido expresada en el Hamiltoniano. En concreto al realizar el sumatorio en las interacciones de primeros vecinos, la expresión  $\sigma_i^z \sigma_{i+1}^z$  implica que el nodo  $i$  de la red está solo conectado con los nodos  $i-1$  e  $i+1$ . Esto es, una red unidimensional. Las condiciones de contorno periódicas vienen impuestas por las expresiones  $\sigma_{n+1}^z \equiv \sigma_1^z$  y  $\sigma_{n+2}^z \equiv \sigma_2^z$ . Esta topología será referida como anillo en lo que queda de texto; y más adelante hay una representación de dos casos particulares (10).

Uno de los motivos por los que se ha escogido este sistema es porque se puede resolver de manera analítica, de hecho es diagonal en la base de Z. En la referencia [5] se encuentran tanto el nivel fundamental en las diferentes fases del sistema como el diagrama de fases todo esto en el límite termodinámico ( $n \rightarrow \infty$ ). Aún así en el anexo I se obtiene esto. En la figura 4 se representa este diagrama de fases.

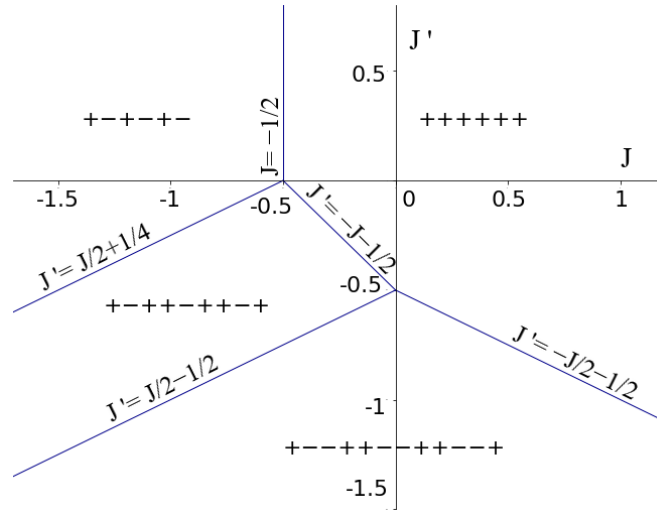


Figura 4: Diagrama de fases del sistema.

### 3.1. Degeneración del fundamental

Antes de entrar a analizar ambos casos, es importante notar que el diagrama de fases de la figura anterior es para el límite termodinámico. Esto se contrapone con los sistemas que vamos a estudiar que son de un valor pequeño de qubits. Además, en gran parte del diagrama de fases el nivel fundamental se encuentra degenerado. Esto se debe a que rotar toda la configuración en bloque tiene la misma energía. Todo esto hace que dependiendo del valor de  $n$  sea posible que el fundamental se desdoble o que se solapen niveles. Es decir, el diagrama de fases será dependiente del número de componentes,  $n$ .

Una manera de ver como es modificado el diagrama de fases por el número de qubits es observando el patrón que hay en cada fase del diagrama en el límite termodinámico 4. Este patrón es el elemento mínimo que se repite. En el caso del “+++++” será simplemente “+”. De esta manera, los patrones de cada fase recorriendo el diagrama en sentido antihorario serán “+”, “+-”, “+-+” y “-+-”. Lo importante de esto es la longitud de cada patrón, puesto que si el número de qubits que estudiamos no es múltiplo de esta longitud las condiciones de contorno periódicas crean conflicto a la hora de dar valor a los qubits del final. Por ejemplo,

cogiendo el caso de “+ - - +” donde predomina la interacción a segundos vecinos. Cuando  $n = 7$  hay conflicto al colocar valores a los últimos qubits porque si se escoge “+ - - + + - -” el conflicto viene entre los qubits 2 y 7 que con las condiciones de contorno periódicas son segundos vecinos que tienen el mismo signo, por lo que aumenta la energía del nivel. Cambiar el último qubit de “-” a “+” tampoco arregla el problema porque ahora el conflicto se da entre los qubits 5 y 7. Si, en cambio, estudiamos el caso  $n = 8$  que es dos veces la longitud del patrón “+ - - +”, la configuración “+ - - + + - - +” no tiene ningún qubit que tenga conflicto con alguno de sus segundos vecinos y no se desdoblará. Por lo que en este caso, esta fase en  $n = 8$  se mantendrá igual a la del límite termodinámico. De esta manera es fácil ver para un número  $n$  de qubits dado, qué fases serán equivalentes a las del diagrama de fases del límite termodinámico y cuáles no. Mencionar que la fase con patrón “+” será siempre respetada pues la longitud de este patrón es 1. También se deduce que el sistema con el número de qubits más bajo y con el mismo diagrama de fases que el límite termodinámico (figura 4) será  $n=12$ .

Como ejemplo de cómo se ve modificado el diagrama de fases se ha escogido el caso  $n=5$ . Para empezar, a través de un diagonalizador de la librería *numpy* de *Python* se han observado los cruces del nivel fundamental para rectas horizontales en el espacio de fases para varios valores de  $J'$ , es decir como si se escaneara. La intención de esto es crear una idea del diagrama de fases y conocer los estados fundamentales para facilitar el siguiente desarrollo. Los estados fundamentales vistos en diversos puntos del espacio de fases son “++++”, “+++-”, “++++-” y “++++--”. Las energías de estos niveles en función de  $J$  y  $J'$  son las mostradas en la tabla 1.

Configuración	Energía
“++++”	$-5(1 + J + J')$
“+++-”	$-1 + 3J - J'$
“++++-”	$-3 - J - J'$
“++++--”	$-1 - J + 3J'$

Tabla 1: Expresiones de las energías de los niveles que son el estado fundamental en algún punto del diagrama de fases.

Igualando dos de estas expresiones se obtienen las líneas del diagrama de fases correspondientes a las transiciones de fase. Realizando esto se obtiene el diagrama de fases de la figura 5a. Como todas las expresiones de las energías son lineales respecto a  $J$  y  $J'$ , las transiciones de fase son rectas. Se ve que la única zona que no se ve modificada es la que corresponde al caso “++++” del límite termodinámico.

Vamos a ver en este caso que hay degeneración en gran parte del diagrama. para ello estudiaremos como evolucionan los niveles a lo largo de las dos rectas que se muestran en la figura 5a. Estas dos rectas son  $J' = J$  (morada) y  $J' = -(J + 1)$  (lima). En la figura 5b se representa  $\Delta_{01}$  que es la diferencia entre el estado con la segunda menor energía y el estado con la menor energía. De este modo, si  $\Delta_{01}$  es 0 significa que el nivel fundamental está degenerado. En las gráficas 5c y 5d se representan los niveles de energía en las rectas estudiadas.

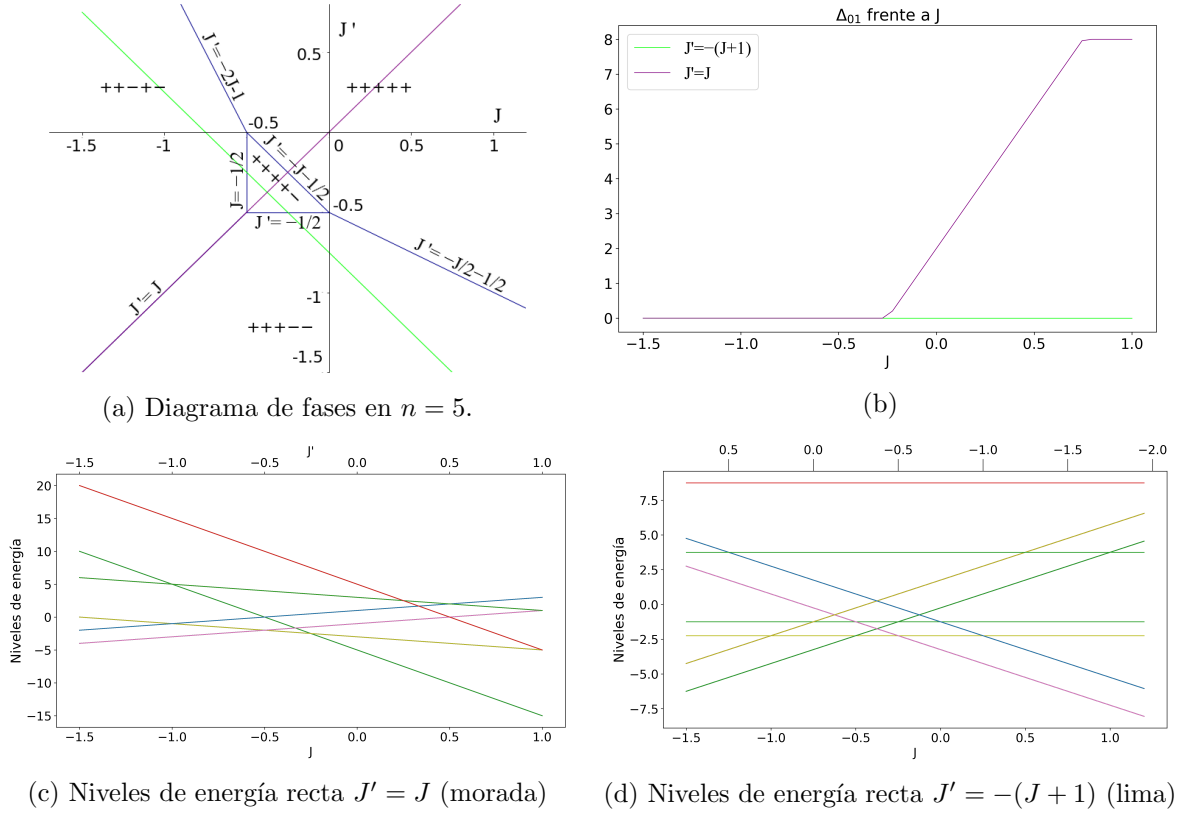


Figura 5: Estudio de la degeneración en el sistema de 5 qubits.

En la gráfica de  $\Delta_{01}$  (5b) se ve que hay degeneración en toda la recta lima y que la morada deja de tener degeneración al pasar a la fase de la configuración “+++++”. Es decir, que la única configuración del fundamental que no tiene degeneración es la de todos los espines hacia arriba. Esto tiene sentido, pues al rotar la configuración nos quedamos con la misma. Rotar la configuración se refiere a mover la configuración 1 a la derecha y el último pasa a ser el primero. Por ejemplo, hacer esta operación sobre la configuración “++-+-” la dejaría como “-++-+”. Ambas configuraciones tienen la misma energía al haber condiciones de contorno periódicas.

En las gráficas de los niveles de energía (5c y 5d) se puede ver también que los cruces en el nivel fundamental se producen en los puntos en que las rectas cruzan transiciones de fase en el diagrama de fases de 5a. En ambos casos se producen en  $J = -0.5$  y  $J = -0.25$ .

Para analizar el sistema en cada fase, se ha escogido un par de valores de  $J$  y  $J'$  para cada una. Los valores escogidos son los mostrados en la tabla 2.

$J$	$J'$
0.0	0.0
-1.0	0.0
-0.5	-0.5
0.0	-0.75

Tabla 2: Pares de  $J$  y  $J'$  escogidos.

La magnitud a estudiar, como se menciona anteriormente, es la energía del nivel fundamental. Por eso, en las gráficas se representará la diferencia del valor obtenido por los algoritmos respecto al valor real. El valor real ha sido calculado mediante el mismo diagonalizador de *numpy* que se ha usado en el estudio de la degeneración en la sección anterior. Las dependencias de interés de

esta magnitud son respecto al número de qubits  $n$  y respecto al número de capas  $l$ . Por esto, las simulaciones en ambos algoritmos han sido realizadas para varios valores de estas magnitudes. En concreto, se han estudiado los intervalos para número de qubits  $n \in [5, 10]$  y número de capas  $l \in [1, 6]$ . Mencionar que, aunque las gráficas de ambas dependencias sean parecidas, variar un parámetro u otro es muy diferente. Es decir, al variar el número de capas lo único que cambia es el *ansatz*. Mientras que al variar  $n$  se está cambiando el sistema que se estudia.

A veces, pese a que el resultado obtenido de la energía sea cercano al real, el vector obtenido mediante el circuito puede diferir significativamente al del fundamental. Un ejemplo de esto es cuando el primer excitado se sitúa cerca del fundamental. En este caso, si el algoritmo obtiene el primer excitado como solución, el valor de la energía obtenido será cercano al real pero el autovector obtenido será ortogonal al fundamental. Para evitar este tipo de problemas, se define la fidelidad como el producto escalar del estado obtenido con el real  $f \equiv |\langle \psi_0 | \psi_r \rangle|^2$ . Esta definición equivale a proyectar el estado obtenido sobre el estado del fundamental. Esta interpretación da paso de forma natural a la generalización de la definición de fidelidad cuando el estado fundamental está degenerado. Es decir, se trata de proyectar el estado obtenido,  $|\psi_r\rangle$ , sobre el subespacio correspondiente al fundamental,  $f \equiv \sum_{i=1}^g |\langle \psi_i | \psi_r \rangle|^2$  con  $g$  la degeneración del fundamental. Si se descompone el estado obtenido como  $|\psi_r\rangle = \alpha|\psi_{\parallel}\rangle + \beta|\psi_{\perp}\rangle$ , donde  $|\psi_{\parallel}\rangle$  es la componente de  $|\psi_r\rangle$  que se encuentra en el subespacio del nivel fundamental y  $|\psi_{\perp}\rangle$  la que no (y por ende, es ortogonal al subespacio del fundamental).

### 3.2. QAOA

El primer algoritmo con el que trabajamos es el ya introducido [Ver Sección 2.1] QAOA. Recordemos que se trata de un algoritmo basado en buscar soluciones a problemas que consideramos clásicos (el Hamiltoniano problema siempre es de tipo Ising Clásico). Se representa en las gráficas de la figura 6, la dependencia del error y de la fidelidad con respecto al número de qubits en el caso de mayor número de capas,  $l = 6$ . En estas gráficas se representan simultáneamente los datos obtenidos de los cuatro pares de  $J$  y  $J'$ .

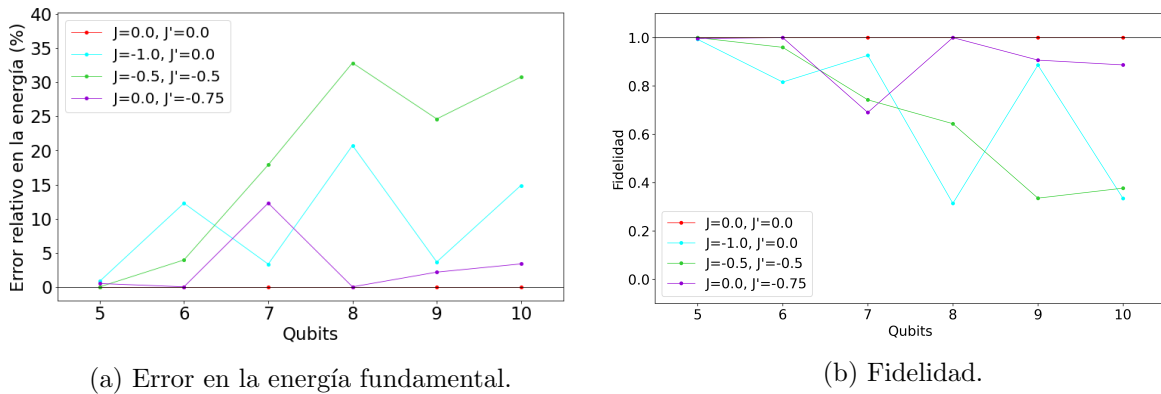


Figura 6: Dependencia del error cometido en la energía (a) y de la fidelidad (b) respecto al número de qubits ( $l = 6$ ).

Se puede apreciar la tendencia de que a mayor número de qubits, peor es el resultado. Esto es esperable, pues la dimensión del espacio de Hilbert que tiene que explorar el algoritmo depende del número de qubits de forma exponencial,  $2^n$ , mientras que el número de parámetros sigue siendo el mismo para un número de capas dado, pues hay 2 parámetros por capa. Por eso, para obtener la misma precisión con un número de qubits mayor será necesario mayor número de capas. En el caso de VQE, el número de parámetros toma la expresión  $n(2l + 1) - 2l$  con  $n$  el número de qubits y  $l$  el de capas. Esta dependencia es lineal, que es mejor que el caso de

QAOA, pero también despreciable para valores de  $n$  suficientemente altos frente a la dimensión del espacio de Hilbert. Se ve también que el resultado depende de la fase en la que se encuentre. Esto se lo atribuimos a la degeneración comentada en el subapartado anterior. Otra cosa que se puede ver es que los datos no aumentan siempre respecto al anterior al aumentar  $n$ . Esto puede tener varias explicaciones. Una de ellas es que los puntos se han cogido de tal manera que cada uno caiga en una fase del diagrama de fases del límite termodinámico. Recordar que el diagrama de fases cambia para cada número de qubits [Ver Sección 3.1]. De esta manera para cada número de qubits el estado fundamental en cada punto tendrá degeneración diferente. Además de que cabe la posibilidad de que caiga en una transición de fase, lo que añade todavía más degeneración.

Se pasa ahora a mostrar la dependencia respecto al número de capas en la figura 7. Se representa el caso de  $n = 10$ . Se escoge este valor para mostrar de forma más clara la diferencia entre las fases.

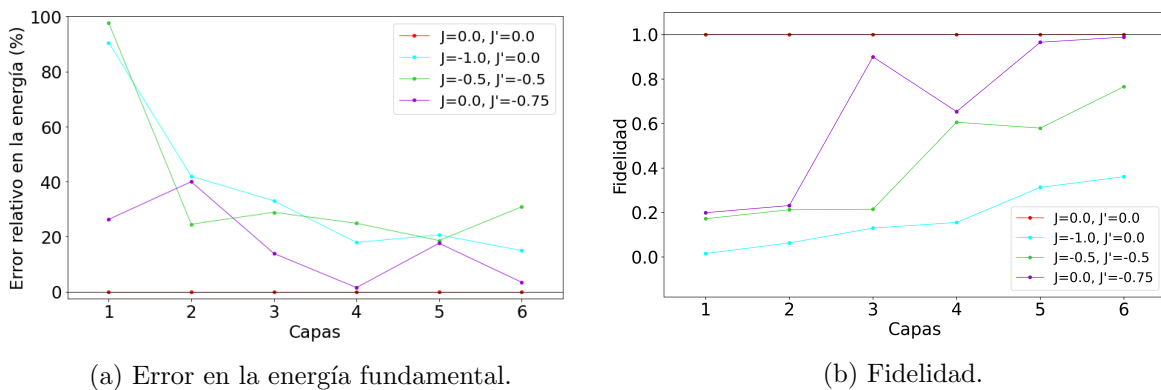


Figura 7: Dependencia del error cometido en la energía (a) y de la fidelidad (b) respecto al número de capas ( $n = 10$ ).

Se puede ver la tendencia del error a disminuir cuando se aumenta el número de capas. Esto también es esperable por la cantidad de parámetros que aporta cada caso. Es decir, a mayor número de capas mayor número de parámetros a optimizar.

### 3.3. VQE

Vistas las flaquezas que presenta QAOA para ciertos casos, pasamos a estudiar cómo se comporta VQE. Recordemos que este algoritmo se diferencia principalmente en que está pensado para obtener estados fundamentales de cualquier tipo de Hamiltoniano: tanto clásico como cuántico gracias a su capacidad de generar estados superpuestos y entrelazados [Ver Sección 2.2]. Por lo que es de esperar que presente un mejor rendimiento que QAOA. Análogamente al caso anterior, se representa primero en las gráficas de la figura 8 la dependencia con respecto al número de qubits para el número de capas  $l = 6$ .

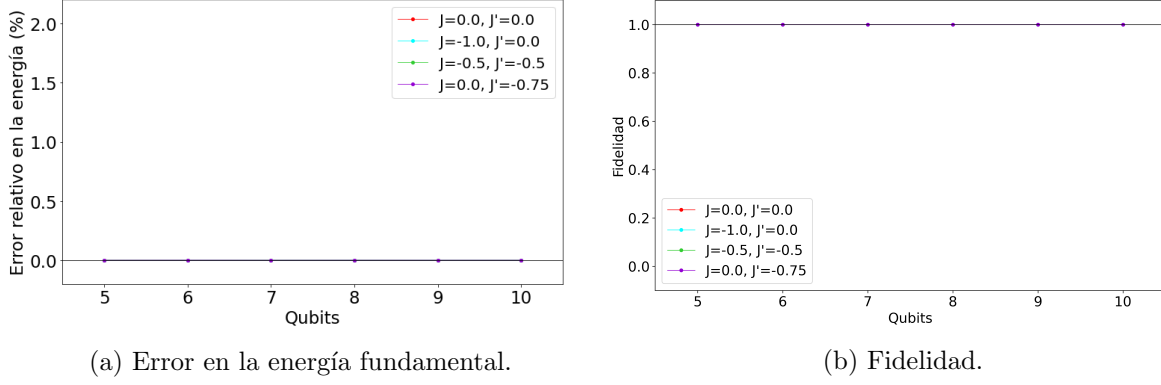


Figura 8: Dependencia del error cometido en la energía (a) y de la fidelidad (b) respecto al número de qubits ( $l = 6$ ).

Se puede ver que los valores obtenidos caen sobre el valor exacto independientemente de la fase y del número de qubits. Era de esperar por lo comentado hasta ahora sobre VQE respecto a QAOA que hubiera cierta mejora. Por lo visto, esta mejora es de carácter cualitativo. Se pasa a estudiar la dependencia respecto al número de capas en el caso de  $n = 10$  para comprobar si esta propiedad se da también para menores números de capas. Se escoge  $n = 10$  para enfatizar este efecto, pues cabe recordar que a mayor número de qubits más le cuesta al algoritmo encontrar la solución. Lo cual suele traducirse en mayor error.

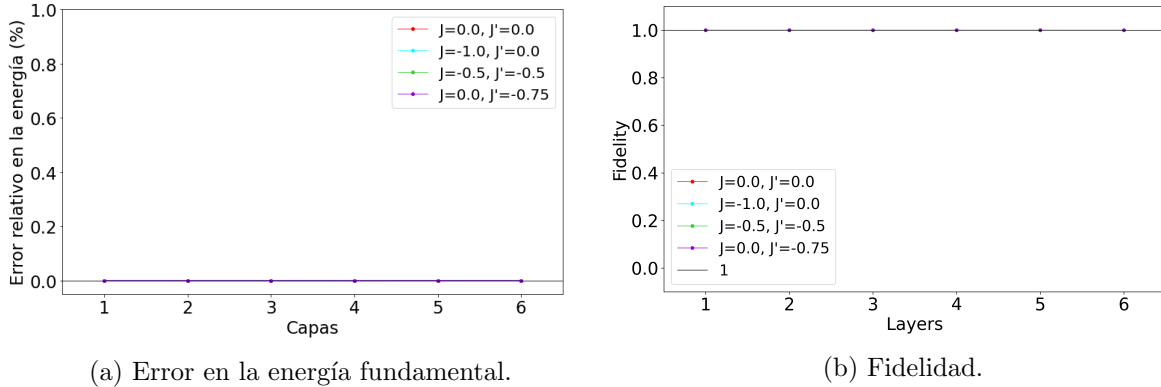


Figura 9: Dependencia del error cometido en la energía (a) y de la fidelidad (b) respecto al número de capas ( $n = 10$ ).

Como se ve, ocurre lo mismo que en la dependencia con respecto al número de qubits, los valores obtenidos caen exactamente sobre los valores reales. Por lo que podemos concluir que hay una diferencia sustancial entre los dos algoritmos vistos a la hora de afrontar este problema. Mientras que en el QAOA, los errores llegan hasta valores de casi el 35% para 6 capas; VQE da los resultados exactos para todos los valores de  $n$  y  $l$  estudiados. Se atribuye estos resultados a la mayor expresibilidad que presenta VQE en cuanto al tipo y la cantidad de estados a los que puede llegar.

## 4. Campo transversal y fenómeno de frustración

### 4.1. Fenómeno de frustración

Cuando se tiene un sistema magnético con solo interacción a primeros vecinos existen dos fases, ferromagnética y antiferromagnética, en función del signo del parámetro  $J$  [6]. Tal y como

se ha definido esta interacción en la sección anterior ( $-J \sum_{i=1}^n \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z$ ) la fase ferromagnética se da cuando  $J > 0$  y la fase antiferromagnética cuando  $J < 0$ . La fase ferromagnética se caracteriza por que las aportaciones a la energía de un punto de la red son negativas si su espín apunta en la misma dirección que los de sus vecinos. En cambio, en la fase antiferromagnética ocurre lo contrario, es decir la energía del sistema será menor cuantos más puntos tengan espines antiparalelos con sus vecinos. De esta manera, aparece un fenómeno llamado frustración en esta fase cuando la red contiene ciclos con un número  $n$  impar de nodos [7]. Ya que, si uno va dando valores de arriba y abajo alternados a los espines del ciclo, todos los nodos impares apuntarán en un sentido y los pares en sentido opuesto. Pero si  $n$  es impar, el último nodo, que tiene índice impar, está conectado con el primero, que también tiene índice impar. Si cambiamos de sentido el espín del último nodo, ahora tendrá el mismo sentido que el penúltimo nodo y no cambia el valor de la energía. De este modo aparece degeneración. Como ejemplo se representa en la figura 10 dos anillos, uno con 5 nodos y otro con 6. Se puede ver la frustración en el primero mientras que en el segundo no aparece.

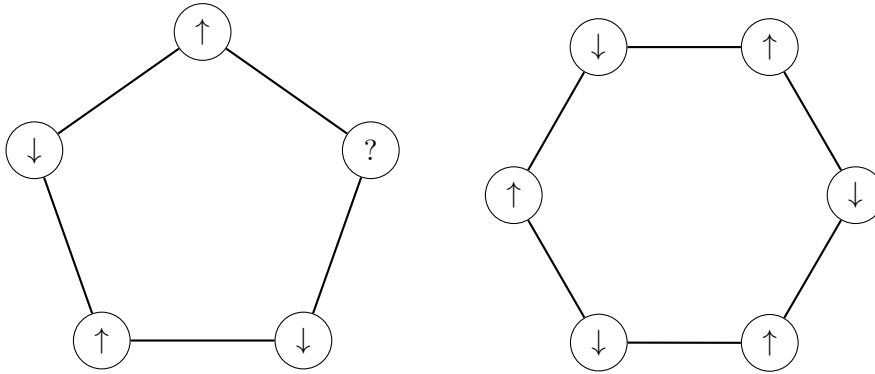


Figura 10: Anillos con número de nodos  $n = 5$  (izq) y  $n = 6$  (dcha). El nodo en el primer anillo con '?' está frustrado.

## 4.2. Campo transversal

El fenómeno de la frustración se comenta porque juega un papel relevante en el sistema a estudiar en esta sección. El sistema en cuestión cuenta con interacción a primeros vecinos, regulada por el parámetro  $J$ , y un campo externo aplicado que en este caso será transversal al eje de interacción. Por lo que el Hamiltoniano del sistema es

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^n \sigma_i^x - J \sum_{i,j \in (n.n.)} \sigma_i^z \sigma_j^z.$$

Se obvia el valor del campo  $h$  por el mismo razonamiento que en el hamiltoniano anterior.

Las transiciones de fase que hay en este hamiltoniano se dan para los valores de  $J$ :  $-1$ ,  $0$  y  $1$ . La transición en  $J = 0$  se entiende puesto que al transicionar a través de este valor, se cambia la naturaleza del material, es decir si se trata de un material ferromagnético o de uno antiferromagnético. Las otras dos transiciones se pueden entender sobre cuál de las dos interacciones tiene mayor influencia sobre la energía. Si  $|J| > 1$ , entonces la interacción sobre primeros vecinos será más relevante es en el caso en el que  $J < -1$  donde esperamos encontrar el fenómeno de frustración. En cambio, si  $|J| < 1$  la influencia del campo será mayor. De esta manera, los sistemas a estudiar se realizaran para cuatro valores diferentes de  $J$ , uno para cada fase. Los valores usados son los mostrados en la tabla 3.

Este Hamiltoniano se ha estudiado sobre dos tipos de redes diferentes. En primer lugar, sobre anillos de  $n$  nodos como los de la figura 10. En segundo lugar se aplicará sobre escaleras

$J$
-1.5
-0.5
0.5
1.5

Tabla 3:  $J$  escogidos.

(*ladders*) de  $n$  nodos. En la correspondiente subsección se presenta una figura con dos ejemplos de esta topología de la red.

#### 4.2.1. Anillos

El estudio sobre los anillos ha sido realizado para un intervalo de valores de  $n$  de 3 a 10, y un intervalo de capas  $l$  de 1 a 6. Se muestra en la gráfica de la figura 11 los errores de las energías para los casos de  $l = 1$  y  $l = 6$  de los cuatro casos.

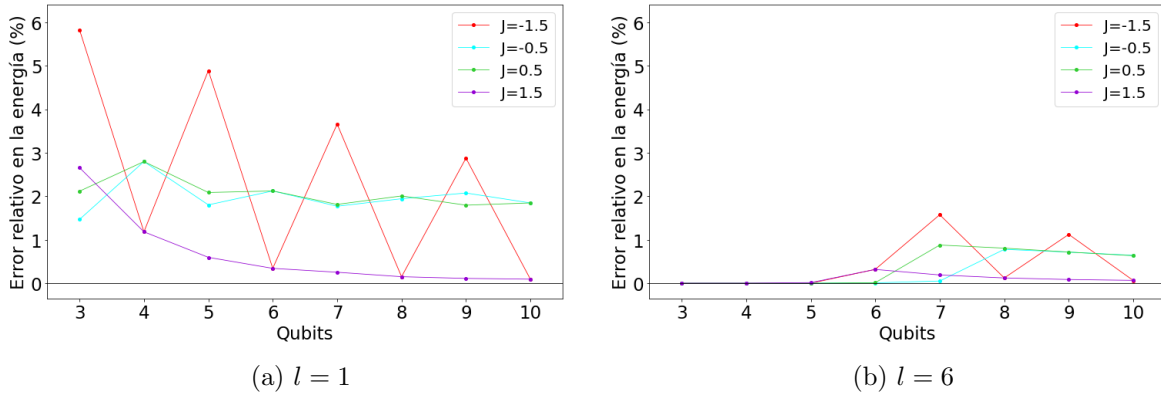


Figura 11: Dependencia del error cometido en la energía respecto al número de qubits para un número de capas  $l = 1$  (a) y  $l = 6$ .

Comparando los dos casos,  $l = 1$  y  $l = 6$ , se aprecia una clara mejora al añadir capas. Se ve además en sendas gráficas que en el caso  $J = -1.5$  el error es mayor cuando el número de qubits es impar que cuando es par. Esto se atribuye al fenómeno de frustración comentado en el subapartado anterior. En  $J = -0.5$  no aparece, esto puede deberse a que en esta fase la intensidad del campo externo es mayor a la interacción entre vecinos, diluyendo así el efecto de frustración. En la figura 14 se muestra la fidelidad del caso  $l = 6$ .

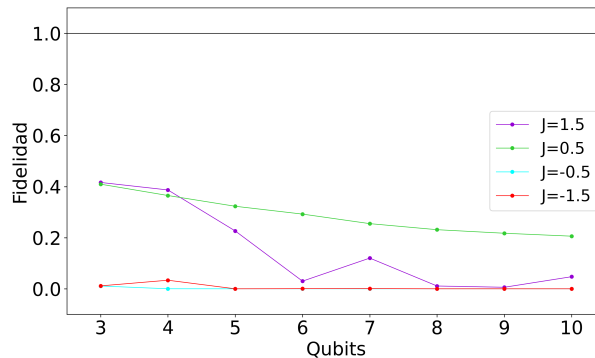


Figura 12: Dependencia de la fidelidad frente al número de qubits  $n$  con número de capas  $l = 6$ .



Se aprecia que en la fidelidad no se logra pasar del 0.4. Un resultado bastante más bajo que en el Hamiltoniano estudiado en la sección anterior.

Se pasa ahora a estudiar las dependencias respecto al número de capas. Se muestran en la figura 13 los casos de los sistemas con número de qubits  $n = 7$  y  $n = 8$ . Esto es con la intención de comparar un caso frustrado ( $n = 7$ ) con otro que no lo está ( $n = 8$ ).

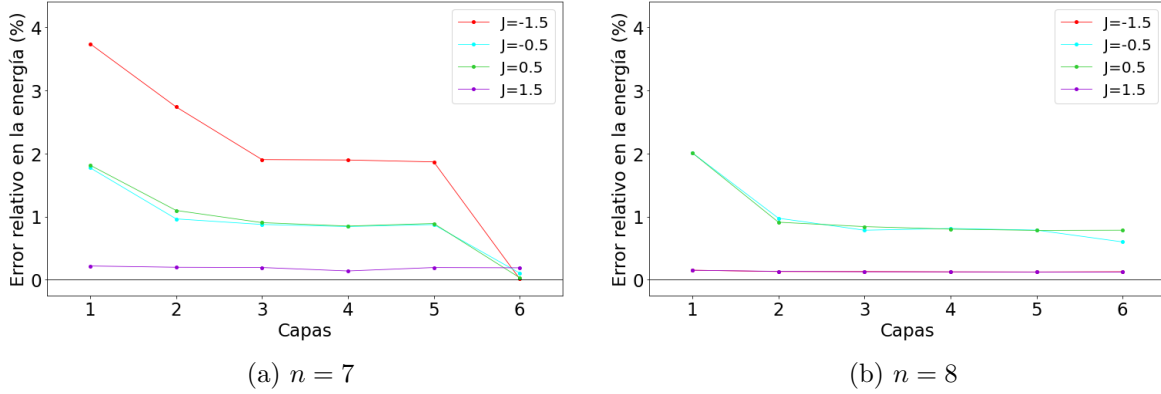


Figura 13: Dependencia del error cometido en la energía respecto al número de capas para  $n = 7$  (a) y  $n = 8$  (b).

La única diferencia notable se encuentra con  $J = -1.5$ ; en el que el error es mayor para  $n = 7$  que para  $n = 8$ . Esto es coherente con los resultados de la dependencia respecto al número de qubits. Si no se tuviera en cuenta el fenómeno de frustración, lo esperable, como se ha comentado ya durante la sección 3, es que al aumentar el número de qubits, aumentara el error; o como mínimo se mantuviera como ocurre en este caso para los demás valores de  $J$ . Por lo que esta diferencia en  $J = -1.5$  con respecto a los demás valores de  $J$  se atribuye a este fenómeno. En la figura 14 se muestran las fidelidades en función del número de capas  $l$  de los casos  $n = 7$  y  $n = 8$ .

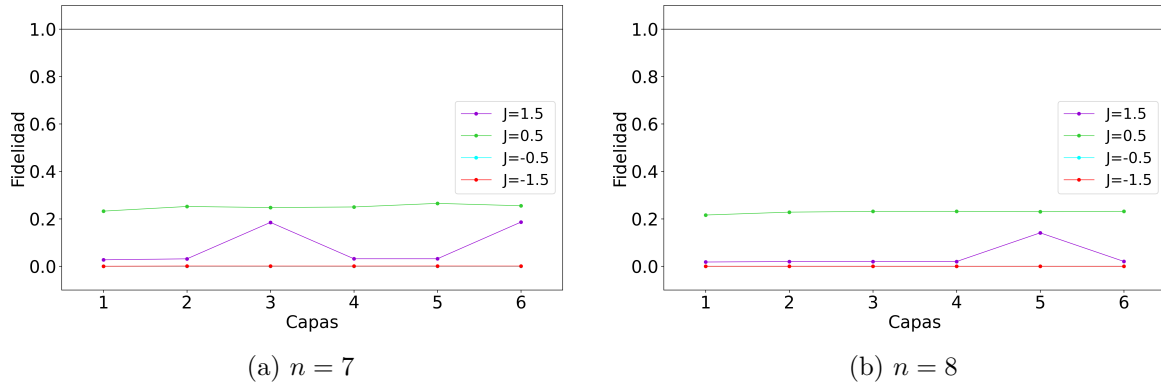


Figura 14: Dependencia de la fidelidad respecto al número de capas para  $n = 7$  (a) y  $n = 8$  (b).

De la misma manera que ocurría en la dependencia con el número de qubits, la fidelidad sigue siendo bastante más baja que en el Hamiltoniano de la sección anterior. Por lo que se puede concluir que en este Hamiltoniano más complejo, VQE sirve para obtener un valor cercano de la energía pero no del estado fundamental.

#### 4.2.2. Obtención del primer excitado

También se puede usar VQE para obtener valores de los otros niveles de energía. Como ejemplo, se ha hecho para el primer excitado. El procedimiento es análogo al caso del nivel

fundamental salvo que al optimizador clásico se le añade una restricción. En concreto, la restricción que se pone es que el estado que se obtenga del circuito debe ser ortogonal al del estado fundamental. El razonamiento detrás de esto es que el primer excitado es el estado de mínima energía en el subespacio ortogonal al estado fundamental. Los valores de las energías del primer excitado obtenidos mediante VQE y por métodos numéricos para los diferentes rangos de  $n$  y  $l$  se muestran en la gráfica de la figura 15. Se tiene como referencia el nivel fundamental respectivo de cada  $J$ .

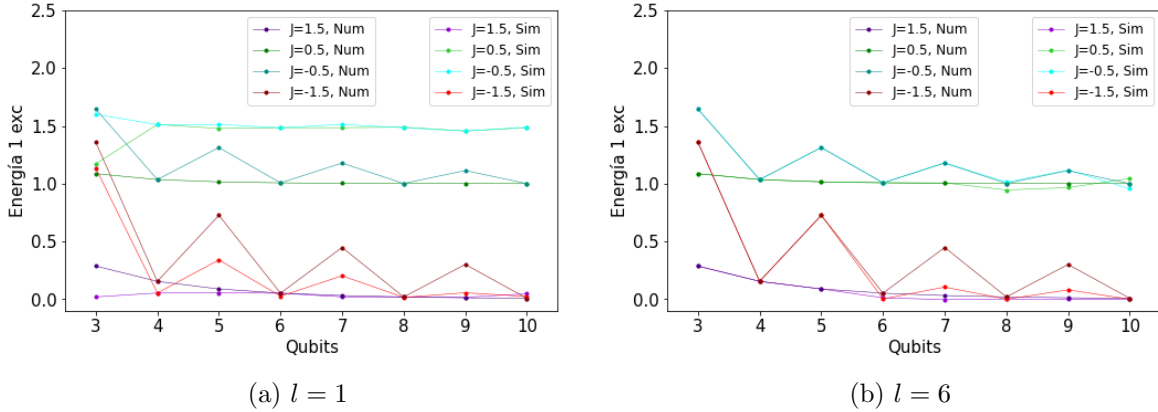


Figura 15: Energía del primer excitado en función del número de qubits con  $l=1$  (a) y  $l=6$  (b) capas. Las líneas obtenidas mediante métodos numéricos se representan con una versión más oscura del color de su respectiva contraparte simulada por VQE con el mismo valor de  $J$ .

Se observa errores mayores cuando hay frustración. Esto se explica a través de la gráfica del nivel fundamental. Errores en el nivel fundamental conllevan errores en el primer excitado puesto que el vector sobre el que se ortogonaliza no es exactamente el autoestado del fundamental. Esto implica que este pueda contribuir parcialmente sobre el valor obtenido del primer excitado y se obtengan valores menores al valor real.

Una vez obtenido el primer excitado se puede obtener el segundo excitado añadiendo las restricciones al optimizar de que el estado que se obtenga del circuito sea ortogonal al fundamental y al primer excitado. De esta manera, consecutivamente se podría obtener todos los niveles de energía. De esto mencionar dos anotaciones. Que un nivel esté degenerado no complica las cosas, puesto que la primera vez se obtiene un vector cualquiera del subespacio de ese nivel de energía y la segunda vez se obtiene un vector del mismo subespacio que es ortogonal al primero. La segunda anotación es que, con propósito de reducir la acumulación de errores o de comparar, se puede invertir el sentido en que se van obteniendo los niveles de energía maximizando el valor de la energía en lugar de minimizando.

### 4.2.3. *Ladders*

En esta subsección se realiza el mismo estudio pero sobre una red más compleja. La red seleccionada es una red escalera o *ladder* con condiciones de contorno periódicas. Esta consiste en que el nodo  $i$ -ésimo se conecta con los nodos  $i+1$  e  $i+2$  (por lo que también estará conectado a los nodos  $i-1$  e  $i-2$ ). Las condiciones de contorno periódicas implican que el nodo  $n-1$  está conectado con el nodo 1 y el nodo  $n$  está conectado con los nodos 1 y 2. Para clarificar el concepto se representa en la figura 16 el caso de  $n=5$  de dos formas distintas. La representación de arriba es la que da nombre a la red y la más intuitiva, pero la representación de abajo también resulta de utilidad.

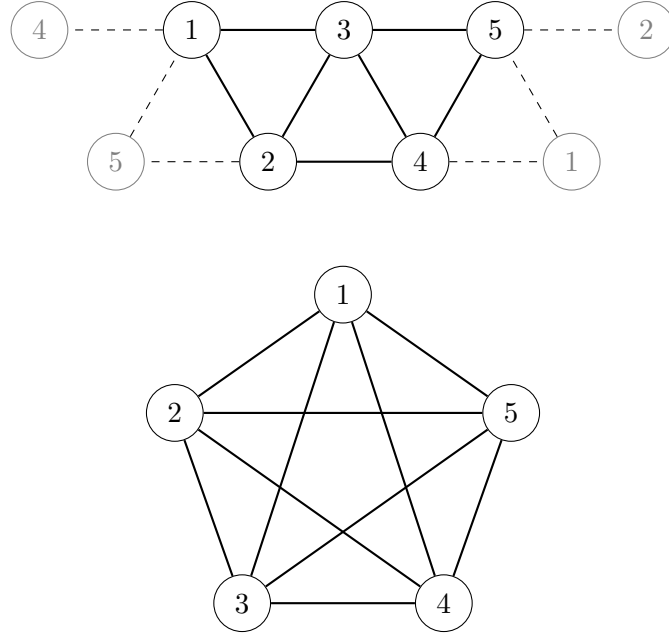


Figura 16: Dos representaciones de la misma *ladder* con número de nodos  $n = 5$ .

En este caso el intervalo de qubits para estudiar el sistema es  $[5, 10]$  debido a que con  $n = 3$  es un triángulo, que es un anillo, y  $n = 4$  se trata de un cuadrado con las diagonales conectadas. El intervalo de capas sigue siendo el mismo que en los casos anteriores,  $[1, 6]$ .

Como en el caso de los anillos, se representa primero la dependencia con el número de qubits.

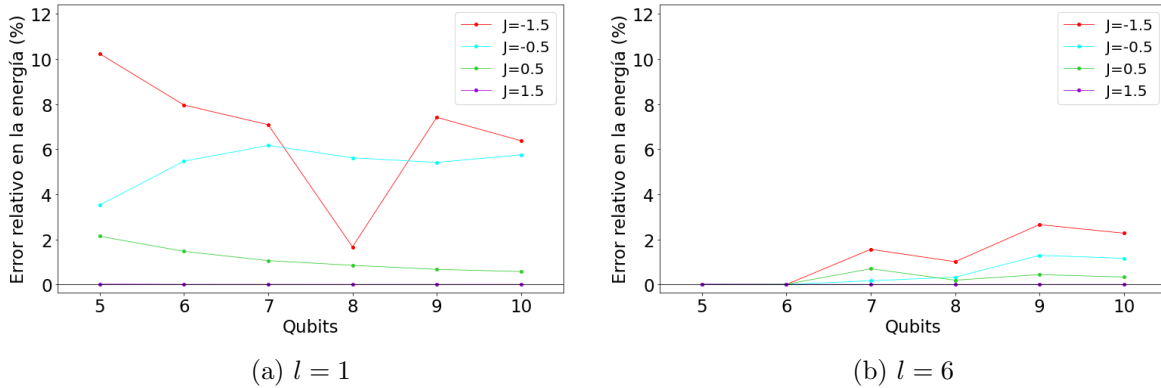


Figura 17: Dependencia del error cometido en la energía respecto al número de qubits para  $l=1$  (a) y  $l=6$  (b).

En general, sigue manteniéndose la tendencia de mayor error a mayor número de qubits. Además, también se mantiene en los datos de  $J = -1.5$  que los casos de número de qubits impares presentan mayor error que el que se esperaría al compararlos con los de número impar. Esto, como en el caso anterior, se atribuye al fenómeno de frustración. De hecho, hilando más fino resalta el caso de  $n = 8$ , en el que se da un error aún menor del que por tendencia se podría inferir. Esto podría atribuirse a los subciclos que se crean entre los nodos con la misma paridad. Es decir, en el caso de  $n = 6$  los dos subciclos serán los dados por los conjuntos de nodos  $\{1, 3, 5\}$  y  $\{2, 4, 6\}$ , los cuales cada uno de estos forman un triángulo en el que habrá frustración. En cambio, en el caso  $n = 8$  los subciclos están formados por los conjuntos de nodos  $\{1, 3, 5, 7\}$  y  $\{2, 4, 6, 8\}$  los cuales forman un cuadrado cada subciclo, en los cuales no habrá frustración. Todo esto es acentuado por el hecho de que estos subciclos contienen poca cantidad de nodos. Sería de esperar que para valores más elevados de qubits, la frustración, al ser un fenómeno que ocurre

en un punto dado de la red, no sea tan determinante. En la figura 18 se muestra la fidelidad.

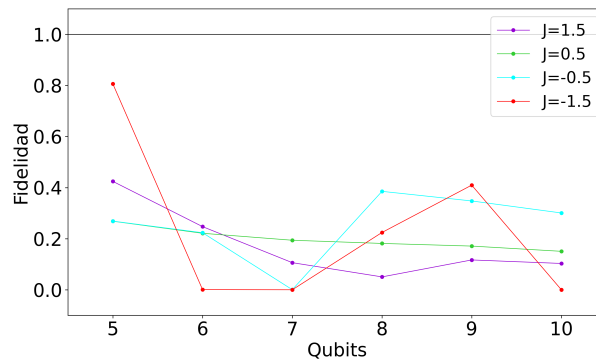


Figura 18: Dependencia de la fidelidad frente al número de capas  $l$ .

Aunque en este caso hay puntos en los que la fidelidad llega hasta 0.8, por lo general sigue en la misma línea que en los anillos.

Se pasa ahora a estudiar la dependencia del error con respecto al número de capas. Se muestra en la figura 19.

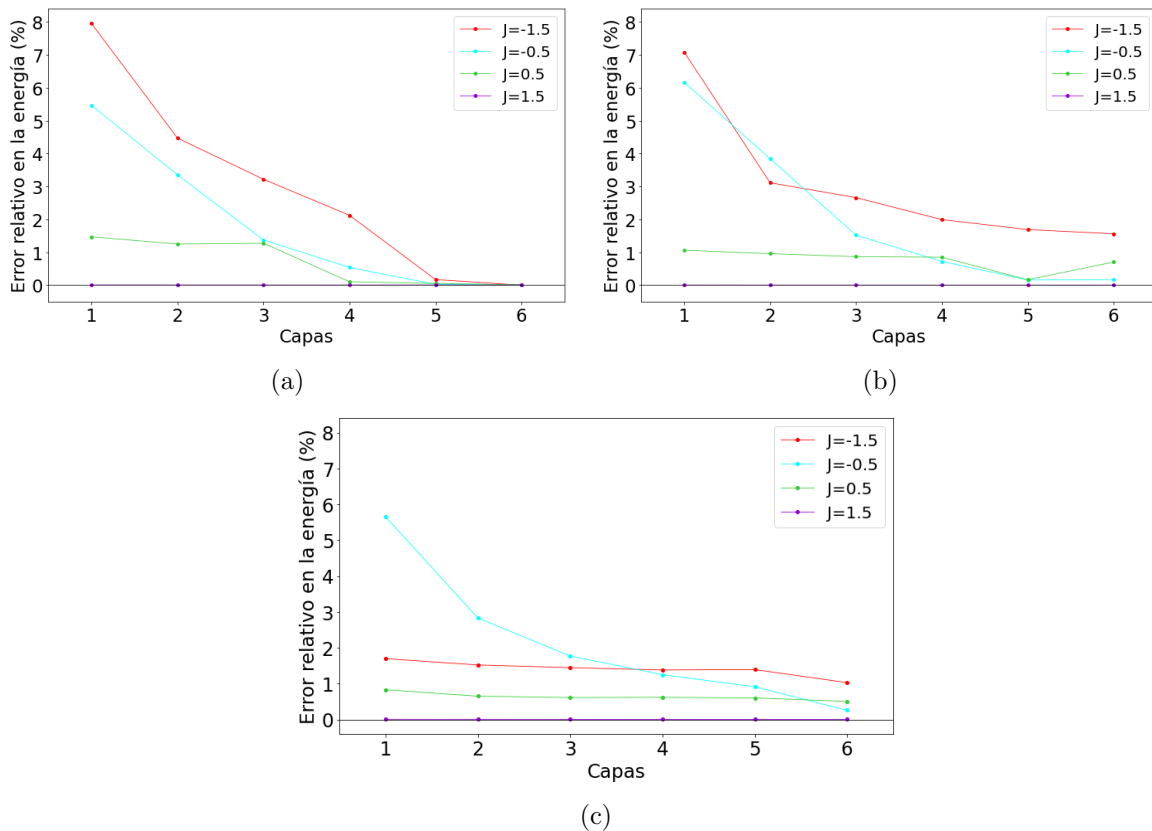


Figura 19: Dependencia del error cometido en la energía respecto al número de capas para  $n = 6$  (a),  $n = 7$  (b) y  $n = 8$  (c).

La dependencia que aparece en general es la vista hasta el momento, a mayor número de capas menor el error. Esto se podría debatir en el caso de  $n = 8$ , en el cual, salvo los datos de  $J = -0.5$ , se mantienen prácticamente constantes en el resto de valores de  $J$ . Esto se atribuye a la complejidad computacional del sistema. Es decir que para encontrar una mejora sustancial

en el error se necesite mayor número de capas. Se muestra en la figura 20 la fidelidad con esta dependencia, para los casos  $n = 7$  y  $n = 8$ .

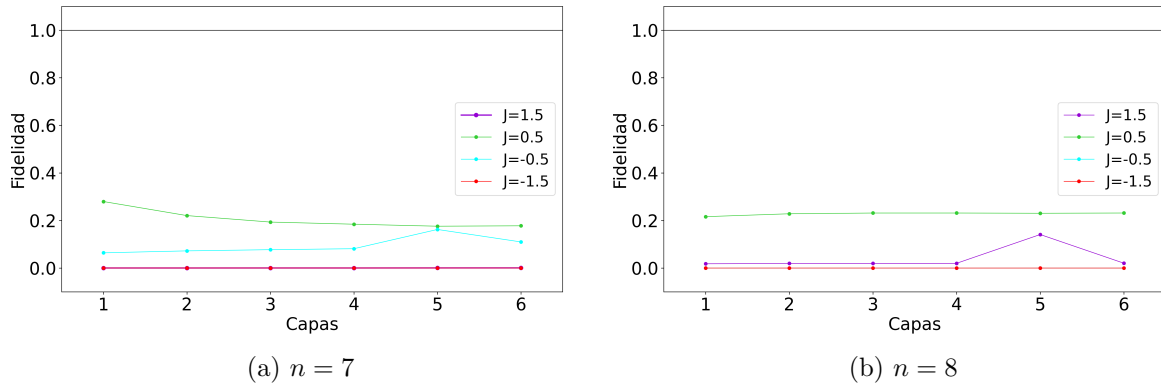


Figura 20: Dependencia de la fidelidad respecto al número de capas para  $n = 7$  (a) y  $n = 8$  (b).

Se ve que la fidelidad sigue saliendo bastante mal respecto a lo ideal. Por lo que se puede concluir que para este tipo de Hamiltonianos más complejos, VQE predice con cierta fiabilidad la energía del nivel fundamental, pero no el autoestado de este.

## 5. Modelo de ruido

Hasta ahora todas las simulaciones realizadas han sido ideales. Esta sección está dedicada a los modelos de ruido. Cuando un circuito tiene ruido, significa que tiene una probabilidad  $p$  de que al ejecutarlo no dé el resultado que tiene que dar sino uno aleatorio del espacio de fases. De esta manera, al ejecutarlo una cantidad grande de veces se tendrá que una proporción en torno a  $p$  de los resultados será aleatoria. De esta manera se tiene una distribución estadística de resultados. La herramienta matemática que se usa en estos casos es la matriz densidad que se define como

$$\rho = \sum_{i=1}^n p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|.$$

De esta manera se puede asociar a un circuito una matriz densidad ejecutandolo un número elevado de veces. En los modelos de ruido en particular, resulta de interés la pureza del circuito. Esta es una buena manera de medir en qué proporción se acerca al caso en que  $p = 0$ , es decir sin ruido. Esta pureza se define como  $\gamma = \text{Tr}(\rho^2)$ ; y es una buena manera de medirlo porque cuanto más cerca se encuentre el valor de  $\gamma$  de 1, menor ruido habrá. Como caso límite se encuentra  $\gamma = 1$  que se traduce como que el estado es puro, es decir que no hay ruido. Es decir, las simulaciones realizadas hasta ahora han sido ejecutadas en un simulador ideal, que por lo tanto tiene  $\gamma = 1$ .

El modelo con ruido además puede simular las características de un ordenador cuántico real de IBM. En este caso se han usado las características del ordenador *nairobi*. Este es uno de los ordenadores que ofrece IBM de forma gratuita a través del servicio *IBM-Quantum* [8]. Mediante este servicio, también existe la posibilidad de enviar algoritmos cuánticos a varios ordenadores. Sin embargo, dado que por cada ejecución de un circuito hay que esperar un tiempo elevado (los ordenadores accesibles de forma gratuita tienen una alta demanda), se ha visto imposible en cuestiones de tiempo y plazo ejecutar alguno de los algoritmos variacionales aquí presentados, los cuales requieren un número elevado de ejecuciones para poder realizar el proceso de optimización, con objeto de realizar una comparativa frente a los resultados ideales.

Como el ordenador cuántico simulado *nairobi* tiene solo 7 qubits, se ve limitado el rango de qubits a estudiar, que pasa a ser el intervalo  $n = [3, 7]$ . Al contrario de los casos ideales vistos hasta ahora, es posible que a partir de cierto número de capas, el error empiece a crecer. Esto se debe a que cuántas más capas contenga el algoritmo, mayor ruido habrá, lo que repercute en el error de la energía. De esta manera, se crea un compromiso en el número de capas en el que los factores que influyen son el número de parámetros y el ruido del circuito.

El sistema que se estudia es el mismo caso que la sección 4.2.1, el de los anillos en el campo transversal. Pero en este caso, la dependencia respecto al número de capas se ha escogido para  $n = 5$ . Esto se debe a la topografía del ordenador simulado *nairobi*, la cual se muestra en la figura 21.

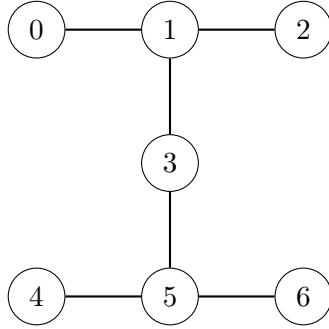


Figura 21: Topología del ordenador cuántico simulado *nairobi*.

Es decir, pese a que el ordenador tenga 7 qubits, solo se pueden escoger qubits en una línea. Como se comentó al final de la sección 2.2, esto complica las cosas para los casos  $n = 6$  y de  $n = 7$ , puesto que se sigue pudiendo ejecutar el circuito pero hay que añadir puertas SWAP que intercambian estados de dos qubits. El problema de estas puertas es que añaden mucho ruido. Así, se pasa a mostrar las dependencias del error de la energía y de la fidelidad para el caso  $n = 5$ .

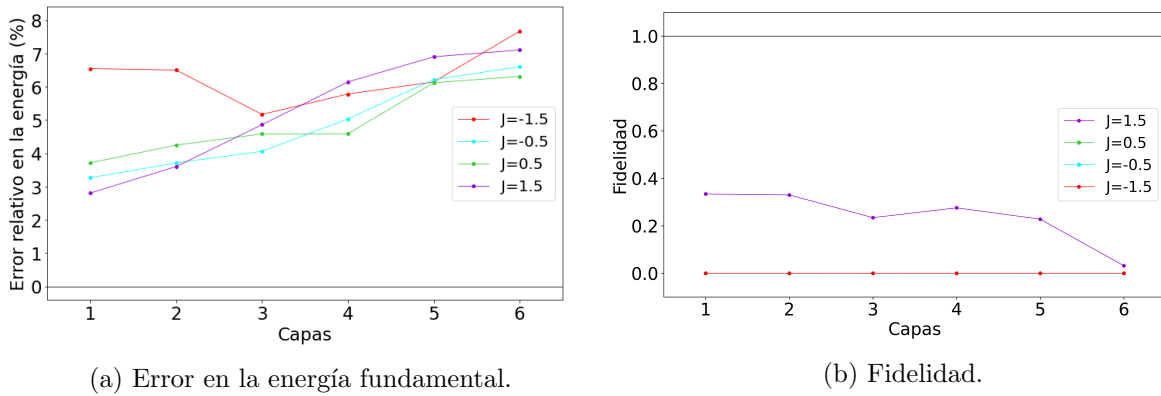


Figura 22: Dependencia del error cometido en la energía (a) y de la fidelidad (b) respecto al número de qubits ( $l = 6$ ).

Se aprecia que en este caso el error tiende a crecer con el número de capas, como era de esperar con lo comentado anteriormente. Aún así, en el único caso que se ve el compromiso entre número de parámetros y de ruido es el  $J = -1.5$ . Esto se puede deber a que es el caso en el que hay frustración y por ende tener más parámetros le sale ventajoso frente al ruido hasta la capa 3. En cuanto a la frustración, sigue saliendo tan baja como en el apartado anterior. En la figura 23 se pasa a mostrar la pureza del circuito en función del número de capas.

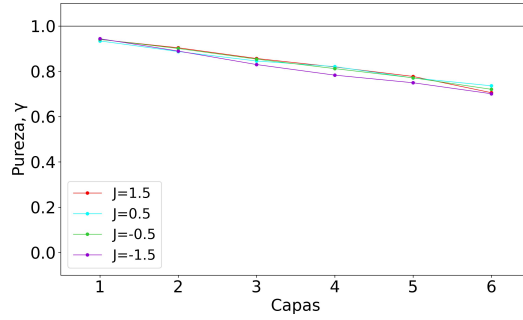


Figura 23: Dependencia de la pureza frente al número de capas  $l$  para  $n = 5$ .

Se ve que a mayor número de capas, menor es la pureza, lo que se traduce en que hay mayor cantidad de ruido, como se había previsto. Se pasa ahora a estudiar en la figura 24 la dependencia con respecto al número de qubits, tanto del error en la energía como en la fidelidad.

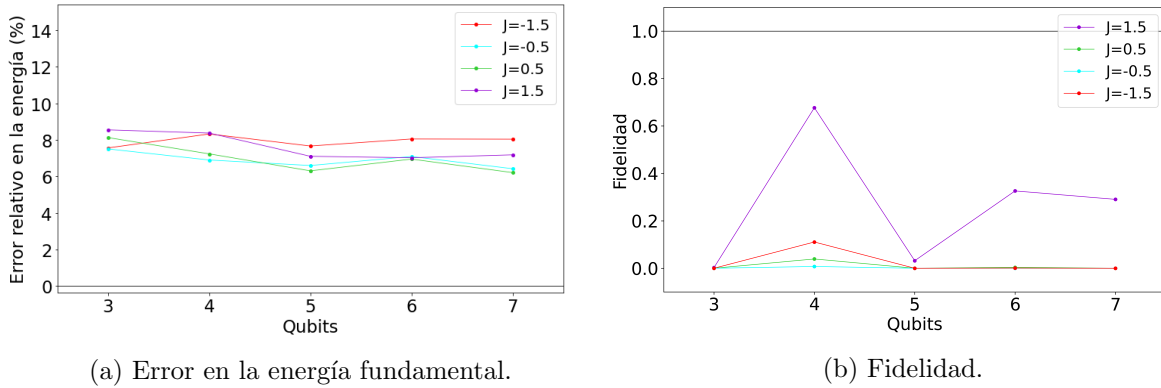


Figura 24: Dependencia del error cometido en la energía (a) y de la fidelidad (b) respecto al número de qubits ( $l = 6$ ).

Comparándolo con el caso ideal estudiado previamente en la figura 11b de la sección 4.2.1, se ve que a raíz del ruido los errores han subido y todos los casos se encuentran entorno al 8%. De hecho no se puede discernir el fenómeno de la frustración. fidelidad sigue la tendencia de lo visto hasta ahora, por lo que se concluye que VQE para este tipo de Hamiltonianos problemas no sirve para obtener el autoestado del nivel fundamental. Se muestra en la figura 25 la dependencia de la pureza con respecto al número de qubits.

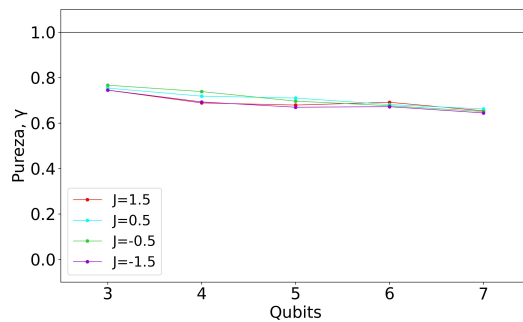


Figura 25: Dependencia de la pureza frente al número de qubits  $n$  para  $l = 6$ .

Se aprecia una disminución de la pureza, y por tanto mayor ruido, a mayor número de qubits.

Esto cuadra con lo comentado al principio de la sección, pues a mayor número de qubits también aumenta el número de puertas lógicas.

## 6. Conclusiones

En este trabajo se ha introducido el concepto de ordenador cuántico y estudiado tanto la representación de estos como su aplicación más inmediata; encontrar solución de problemas que mediante otros métodos son irrealizables en la práctica. Han sido introducidos dos algoritmos variacionales de estos ordenadores, su contexto y funcionamiento, y posteriormente han sido comparados aplicándolos sobre un Hamiltoniano problema resoluble analíticamente. Luego, con el algoritmo más solvente de los vistos, VQE, se han estudiado sistemas con Hamiltonianos más complejos. En los que fenómenos como la frustración influyen sobre los resultados del algoritmo. Tanto en la comparación de algoritmos como en el posterior estudio con VQE, se ha visto la relación que hay entre el error que cometen, y el número de qubits que contiene el sistema que se está estudiando y la cantidad de capas  $l$  con las que están formados los circuitos de sendos algoritmos. Además no solo se ha tenido en cuenta el error de la magnitud a estudiar. Se ha introducido la noción de fidelidad con la intención de comprobar hasta qué punto el estado que obtiene el circuito tiene relación con el autoestado de la energía que se está intentando encontrar. También mencionar que se ha profundizado previamente en los sistemas analizados mediante los algoritmos.

Finalmente, se ha presentado un modelo de ruido con la intención de introducir el concepto de ruido en un ordenador cuántico con mayor profundidad. Además de simular con mayor precisión la solvencia de un ordenador cuántico real. Esto también ha servido para comparar como influye el ruido a los ordenadores cuánticos respecto a los casos ideales.

Para acabar, comentar que los objetivos de este Trabajo de Fin de Grado han sido la introducción en un campo nuevo e interesante para mí como lo es la computación cuántica. Esta introducción ha consistido en ver como se aplican los conocimientos de la mecánica cuántica adquiridos durante el grado de manera creativa con la intención de rodear un muro que los matemáticos llevan cuarenta años analizando. Además, aprovechar esto aprendido para analizar sistemas físicos de interés a la hora de ponerlo a prueba.

## Referencias

1. Cerezo, M. *y col.* Variational quantum algorithms. *Nature Reviews Physics* **3**, 625-644 (2021).
2. Farhi, E., Goldstone, J. y Gutmann, S. A quantum approximate optimization algorithm. *arXiv preprint arXiv:1411.4028* (2014).
3. Kandala, A. *y col.* Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets. *Nature* **549**, 242-246 (2017).
4. Bravo-Prieto, C., Lumberras-Zarapico, J., Tagliacozzo, L. y Latorre, J. I. Scaling of variational quantum circuit depth for condensed matter systems. *Quantum* **4**, 272 (2020).
5. Morita, T. y Horiguchi, T. Spin orderings of the one-dimensional ising magnet with the nearest and next nearest neighbor interaction. *Physics Letters A* **38**, 223-224 (1972).
6. Coey, J. M. *Magnetism and magnetic materials* (Cambridge university press, 2010).
7. Toulouse, G. en *Modern trends in the theory of condensed matter* 195-203 (Springer, 1980).
8. *IBM Quantum*. <https://quantum-computing.ibm.com/>. (2021).



## Anexo I. Diagrama de fases del Hamiltoniano usado en la comparativa de VQAs en el límite termodinámico

Sea el Hamiltoniano estudiado en la sección 3,

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^n \sigma_i^z - J \sum_{i=1}^n \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - J' \sum_{i=1}^n \sigma_i^z \sigma_{i+2}^z.$$

En este apéndice se realiza la obtención de las transiciones en el diagrama de fases en el caso del límite termodinámico ( $n \rightarrow \infty$ ). Se parte de los estados fundamentales dados en la referencia [5], que son los que se muestran en el diagrama de la figura 4. Estos son los mostrados en la tabla 4. Sus energías se obtienen de la expresión  $E = - \sum_{i=1}^n \sigma_i^z - J \sum_{i=1}^n \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - J' \sum_{i=1}^n \sigma_i^z \sigma_{i+2}^z$ . Donde se sustituye  $\sigma_i^z$  por  $+1$  si el qubit  $i$ -ésimo se encuentra en el estado “ $+$ ” y por  $-1$  si se encuentra en el estado “ $-$ ”. Al estudiar el límite termodinámico se estudia  $E/n$  en lugar de la energía en sí, porque sino esta diverge al tomar el límite  $n \rightarrow \infty$ .

Configuración	$E/n$
“++++”	$-1 - J - J'$
“+-+-”	$J - J'$
“+--+”	$-1/3 + (J + J')/3$
“+--+-+”	$J'$

Tabla 4: Expresiones de las energías de los niveles que son el estado fundamental en algún punto del diagrama de fases.

Entrando en más detalle, el proceso de obtención de la energía por qubit para cada estado es el siguiente tomando como ejemplo el caso “+--+” . Un tercio de los qubits tienen espín down mientras que dos tercios tienen espín up; por lo que el primer sumando tendrá valor  $-\sum_{i=1}^n \sigma_i^z = -(2n/3 - n/3) = -n/3$ . El segundo sumando tiene en cuenta la interacción a primeros vecinos. El sumando  $i$ -ésimo será  $+1$  si el qubit  $i$  y el  $i+1$  tienen el mismo signo y será  $-1$  en caso contrario. Mirando el patrón, se ve que un tercio de los qubits tienen el vecino de la posición siguiente con el mismo signo, en el resto de qubits se da el caso contrario, por lo que el segundo sumando de la energía queda  $-J \sum_{i=1}^n \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z = -J(n/3 - 2n/3) = Jn/3$ . El tercer y último sumando será un caso análogo pero con respecto a los segundos vecinos. Un tercio de los qubits aportan  $+1$  a este sumatorio y el resto  $-1$ . Por lo que el tercer sumatorio queda como  $-J' \sum_{i=1}^n \sigma_i^z \sigma_{i+2}^z = -J'(n/3 - 2n/3) = J'n/3$ . Por lo que la energía queda como  $E = n[-1/3 + (J + J')/3]$  y la energía por qubit  $E/n = -1/3 + (J + J')$  que es lo que se muestra en la tabla. Notar que en el procedimiento no se ha tenido en cuenta las condiciones de contorno. Esto es porque al tomar el límite  $n \rightarrow \infty$ , la influencia de los contornos se hace cero. Es decir, si se supone que la influencia de los límites del material sobre la energía es  $\Delta E_C$ , esto varía entre un valor de  $n$  y el siguiente, pero se queda entorno a un valor dado. Por lo que en la energía por unidad de qubit tendrá una dependencia similar a  $\Delta E_C / n$  que tiende a cero cuando  $n \rightarrow \infty$ .

Una vez obtenidos los valores de la energía por qubit, se igualan las expresiones de dos configuraciones para ver donde se encuentran las transiciones de fase. Como ejemplo la transición entre los estados “++++” y “+-+-”. Igualando las expresiones le sigue el desarrollo

$$-1 - J - J' = J - J' \quad \Rightarrow \quad 2J = -1 \quad \Rightarrow \quad J' = -1/2.$$

Que es la ecuación de la recta de la transición entre estos dos estados que hay en el diagrama de fases 4.