



*Facultad
de
Ciencias*

**ESTUDIO DE SISTEMAS
CUÁNTICOS SENCILLOS MEDIANTE
ALGORITMOS DE COMPUTACIÓN CUÁNTICA**

Study of simple
quantum systems using
quantum computing algorithms

Trabajo de Fin de Grado
para acceder al

GRADO EN FÍSICA

Autor: Juan Gómez Mazorra

Director: Francisco Matorras Weinig

Co-Director: Pablo Martínez Ruiz del Árbol

Julio - 2024

Quiero agradecer a todas las personas que han hecho posible este trabajo.

A mis profesores, por enseñarme todo lo aprendido.

A mi familia, por los que siguen a mi lado y por los que ya no están.

*A mis amigos de Logroño, de Santander y a los que me ha dado el trabajo,
por todos los momentos vividos y por acompañarme en este camino.*

*Un especial agradecimiento a Francisco y a Pablo,
por vuestra dedicación y guía a lo largo del trabajo.*

Por último, a mis padres, Belén y Carlos, por hacer todo esto posible.

Abstract

In this work, the underlying theory of variational quantum algorithms applied to the study of simple quantum systems has been reviewed. Using the Qiskit library, the VQE (Variational Quantum Eigensolver) algorithm has been implemented to obtain the ground state energy of three simple quantum systems: the hydrogen molecule, an electron in a Yukawa potential, and two electrons in an infinite potential well with contact interaction.

The algorithm parameters that yielded the best results were the *UCCSD ansatz*, the *COBYLA* optimizer, and a high number of shots. Although the results of simulations using quantum algorithms did not achieve the same precision as classical algorithms, especially under noise models, the implementation of the VQE algorithm has been successful in exploring the current capabilities and limitations of quantum computing.

These results demonstrate the ability of quantum algorithms to solve simple quantum systems, despite current challenges. Furthermore, they underscore their potential to surpass classical algorithms in solving complex quantum systems.

Keywords: quantum computing, VQE, qiskit, second quantization

Resumen

En este trabajo, se ha revisado la teoría subyacente a los algoritmos cuánticos variacionales aplicados al estudio de sistemas cuánticos sencillos. Utilizando la biblioteca *Qiskit*, se ha implementado el algoritmo *VQE* (*Variational Quantum Eigensolver*) para obtener la energía del estado fundamental de tres sistemas cuánticos sencillos: la molécula de hidrógeno, un electrón en un potencial de Yukawa y dos electrones en un pozo de potencial infinito con un potencial de interacción de contacto.

Los parámetros del algoritmo que han devuelto los mejores resultados han sido el *ansatz UCCSD*, el optimizador *COBYLA* y un número elevado de *shots*. Aunque los resultados de las simulaciones con algoritmos cuánticos no han alcanzado la misma precisión que los algoritmos clásicos, especialmente bajo modelos de ruido, la implementación del algoritmo *VQE* ha sido exitosa, permitiendo explorar las capacidades actuales y las limitaciones actuales de la computación cuántica.

Estos resultados muestran la capacidad de los algoritmos cuánticos para resolver sistemas cuánticos sencillos, a pesar de los desafíos presentes. Además, subrayan su potencial para superar a los algoritmos clásicos para resolver sistemas cuánticos complejos.

Palabras clave: computación cuántica, VQE, qiskit, segunda cuantización

Índice

1	Introducción	1
1.1	Comienzos de la computación cuántica	1
1.2	Qubits	2
1.3	Sistemas con varios qubits	3
1.4	Puertas cuánticas	4
1.5	Circuitos cuánticos	5
1.6	Ordenadores cuánticos	6
1.7	Ventajas de la computación cuántica	6
1.8	Situación actual	7
1.9	<i>Qiskit</i>	7
1.9.1	<i>Qiskit Nature</i>	8
1.9.2	<i>Qiskit Algorithms</i>	8
1.9.3	<i>Qiskit Aer</i>	8
1.9.4	<i>Qiskit IBM Runtime</i>	8
1.10	<i>IBM Quantum Platform</i>	8
2	Algoritmos de computación cuántica	9
2.1	<i>VQE</i>	10
2.1.1	<i>Estimator</i>	11
2.1.2	<i>Ansatz</i>	11
2.1.3	Optimizador	12
2.2	Preparación del Hamiltoniano	13
2.2.1	Segunda cuantización	14
2.2.2	Transformación de operadores fermiónicos a operadores de qubits	16
3	Molécula de hidrógeno	17
3.1	Estudio de los diferentes parámetros del algoritmo <i>VQE</i>	18
3.2	Modelos de ruido	23
3.3	Resumen	24

4	Potencial de Yukawa	25
4.1	Métodos clásicos	26
4.2	Simulaciones de algoritmos cuánticos sin ruido	29
4.3	Simulaciones de algoritmos cuánticos con ruido	33
4.4	Ejecuciones en ordenadores cuánticos	34
4.5	Resumen	34
5	Pozo de potencial infinito	35
5.1	Métodos clásicos	37
5.2	Simulaciones de algoritmos cuánticos sin ruido	39
5.3	Simulaciones de algoritmos cuánticos con ruido	42
5.4	Resumen	42
6	Aplicación directa de la segunda cuantización	43
6.1	Base del Hamiltoniano individual	43
6.2	Segunda cuantización	45
6.3	Resultados	46
7	Conclusiones	47
	Bibliografía	49
A	Molécula de hidrógeno	51
B	Potencial de Yukawa	53
C	Pozo de potencial infinito	57
C.1	Métodos clásicos	58

Capítulo 1

Introducción

La computación cuántica es una rama emergente de la ciencia y la tecnología que tiene el potencial de revolucionar la forma de abordar los problemas complejos que son inmanejables para los ordenadores tradicionales. Aprovechando principios de la mecánica cuántica como la superposición y el entrelazamiento, los ordenadores cuánticos tienen la capacidad de realizar cálculos a velocidades exponencialmente superiores en comparación con sus homólogos tradicionales. Con este trabajo se busca comprender los fundamentos teóricos de la computación y los algoritmos cuánticos. Para ello, se han realizado simulaciones de sistemas cuánticos sencillos con algoritmos cuánticos.

Para comenzar, se introducirá brevemente la historia y los conceptos básicos de la computación cuántica necesarios para entender el funcionamiento de los algoritmos cuánticos. Se explicará qué son los ordenadores cuánticos y los elementos que los componen. Además, se describirán las herramientas empleadas para simular algoritmos cuánticos en ordenadores clásicos junto a una plataforma que permite acceder a ordenadores cuánticos reales. Todos estos conceptos se explican con más detalle en [1].

1.1. Comienzos de la computación cuántica

En 1980, Yuri Manin fue la primera persona en mencionar la idea de computación cuántica. [2] Ese mismo año, Paul Benioff construyó un Hamiltoniano cuántico microscópico como modelo de las máquinas de Turing. [3] Un año más tarde, de manera independiente a las ideas propuestas por Yuri Manin, Richard Feynman, en su conferencia *Simulating Physics with Computers*, propuso que los ordenadores clásicos tenían dificultades para simular sistemas cuánticos de manera eficiente debido al crecimiento exponencial de los recursos computacionales requeridos. [4] Años más tarde, en 1994, Peter Shor desarrolló el algoritmo de factorización de Shor, demostrando el potencial de los ordenadores cuánticos para resolver problemas que son intratables para los ordenadores clásicos. [5]

Desde entonces, empresas como *IBM*, *Microsoft* o *Google* comenzaron a interesarse en esta tecnología, lo cual ayudado a acelerar su desarrollo. *IBM* fue una de las primeras grandes empresas en involucrarse en la investigación de la computación cuántica. En 2003, anunciaron su primer ordenador cuántico y en 2016 lanzaron el primer ordenador cuántico comercial, disponible a través de la nube.

1.2. Qubits

El concepto fundamental de la computación clásica es el bit. De manera análoga, la computación cuántica se construye sobre el concepto de qubit (*quantum bit*). Un bit clásico solo puede encontrarse en los estados 0 o 1, mientras que un qubit puede existir en una superposición de los estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$, los cuales forman una base ortonormal.

La principal diferencia entre los bits y los qubits es que el qubit no está limitado a estar en uno de esos dos estados, puede estar en cualquier combinación lineal de ambos (1.1) hasta que se realice una medida y colapse en uno de dichos estados.

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (1.1)$$

Donde α y β son números complejos que determinan la amplitud de probabilidad de los estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$, respectivamente. La condición de normalización impone que $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

El estado de un qubit puede representarse en tres dimensiones reescribiendo la Ecuación (1.1).

$$|\psi\rangle = e^{i\gamma} \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\varphi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle \right] \quad (1.2)$$

Donde γ , θ y φ son números reales. El factor $e^{i\gamma}$ puede ser ignorado debido a que no tiene efectos observables, obteniendo la siguiente ecuación.

$$|\psi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\varphi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |1\rangle \quad (1.3)$$

Donde θ y φ pueden interpretarse como las coordenadas de un punto de una esfera tridimensional, conocida como la esfera de Bloch, representada en la Figura 1.1.

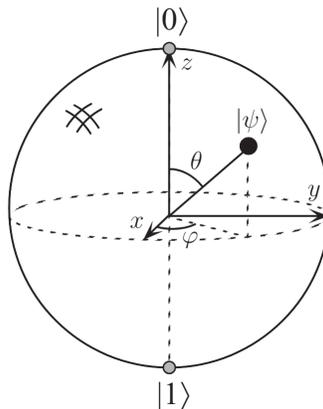


Figura 1.1: Representación de un qubit como una esfera de Bloch. [1]

1.3. Sistemas con varios qubits

En un sistema con dos bits hay cuatro estados posibles: 00, 01, 10 y 11. Por otro lado, en un sistema con dos qubits, el estado del primer qubit, $|\phi(1)\rangle$, pertenece al espacio de Hilbert \mathcal{H}_1 , y el estado del segundo qubit, $|\chi(2)\rangle$, pertenece al espacio de Hilbert \mathcal{H}_2 .

$$|\phi(1)\rangle \in \mathcal{H}_1, \quad |\chi(2)\rangle \in \mathcal{H}_2 \quad (1.4)$$

Por lo tanto, el estado descrito por ambos qubits, $|\psi\rangle$, pertenece al espacio \mathcal{H} definido por el producto tensorial de los espacios \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 .

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \quad (1.5)$$

$$|\phi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle \in \mathcal{H} \quad (1.6)$$

El estado de ambos qubits, $|\psi\rangle$, queda descrito por la superposición de varios estados.

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{i,l} c_{il} |u_i(1)\rangle \otimes |v_l(2)\rangle \\ &= c_{00}|0\rangle \otimes |0\rangle + c_{01}|0\rangle \otimes |1\rangle + c_{10}|1\rangle \otimes |0\rangle + c_{11}|1\rangle \otimes |1\rangle \\ &= c_{00}|00\rangle + c_{01}|01\rangle + c_{10}|10\rangle + c_{11}|11\rangle \end{aligned} \quad (1.7)$$

Donde $\{|u_i(1)\rangle\}_{i=1,2,\dots}$ es la base de \mathcal{H}_1 y $\{|v_l(2)\rangle\}_{l=1,2,\dots}$ es la base de \mathcal{H}_2 .

En consecuencia, cuatro estados forman la base del sistema: $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$ y $|11\rangle$. Como en el caso de un único qubit, cada uno de los posibles resultados ocurre con una probabilidad $|c_{ij}|^2$, colapsando al estado $|ij\rangle$ tras realizar una medida.

De la Ecuación (1.7), se puede determinar que un sistema de n qubits se describe mediante 2^n estados vectoriales en el espacio de Hilbert. Aunque un ordenador clásico de n bits también tiene 2^n estados posibles, la diferencia crucial es que un ordenador cuántico puede operar simultáneamente con todas las combinaciones lineales de estos estados, gracias al principio de la superposición cuántica. En contraste, un ordenador clásico solo puede operar en un estado específico a la vez, limitando su capacidad para manejar grandes cantidades de información simultáneamente. Esta característica es esencial, ya que esto permite a los ordenadores cuánticos aprovechar el crecimiento exponencial del espacio de Hilbert con el número de qubits.

Además, el entrelazamiento cuántico es otra propiedad fundamental en los sistemas con varios qubits. Dos o más qubits está entrelazados si se encuentran en un estado cuántico conjunto donde el estado de cada qubit no puede describirse independientemente del estado de los otros qubits. Este entrelazamiento implica que la medida del estado de un qubit afecta instantáneamente al estado del otro, independientemente de la distancia que los separa. Esta propiedad es crucial para aplicaciones en computación cuántica como la criptografía cuántica o el uso de diversos algoritmos cuánticos.

1.4. Puertas cuánticas

La computación cuántica describe los cambios en un estado cuántico mediante el uso de circuitos cuánticos, formados por puertas cuánticas elementales, análogos a los circuitos eléctricos y puertas lógicas de los ordenadores clásicos. Los circuitos cuánticos manipulan la información a través de puertas cuánticas que transforman los estados cuánticos actuando como operadores lineales.

La linealidad de las puertas cuánticas implica que cualquier transformación debe ser representada por una matriz unitaria, $U^\dagger U = I$. Estas puertas se pueden describir por una matriz que, al actuar sobre un estado cuántico, preserva la normalización de las amplitudes de probabilidad. Una de las puertas cuánticas más simples y fundamentales es la puerta X , que intercambia las amplitudes de los estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$, similar a la puerta NOT en un ordenador clásico.

A diferencia de la computación clásica, donde la puerta NOT es la única puerta no trivial de un solo bit, en el ámbito de la computación cuántica existen múltiples puertas no triviales de un solo qubit. Un ejemplo importante es la puerta Hadamard, H , que transforma los estados base en superposiciones equitativas, proporcionando una herramienta crucial para muchos algoritmos cuánticos.

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

Las matrices de Pauli, X , Y y Z , también juegan un papel fundamental en la computación cuántica, representando un conjunto completo de operaciones básicas que pueden realizarse sobre un qubit. Son matrices unitarias y hermíticas que forman una base para el espacio de operadores de un qubit. La puerta X , introducida anteriormente, intercambia los estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$, la puerta Y realiza una combinación de rotaciones alrededor de los ejes x y z , mientras que la puerta Z cambia el signo del estado $|1\rangle$ dejando inalterado el estado $|0\rangle$. Estas puertas, junto con la identidad, I , pueden describir cualquier operación de un solo qubit mediante combinaciones lineales.

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

La computación cuántica no se limita a operaciones con un solo qubit, también incluye puertas cuánticas de múltiples qubits que permiten la manipulación y entrelazamiento de estados cuánticos complejos. En el ámbito clásico, las puertas de múltiples bits, como las puertas AND, OR, XOR y NAND, son fundamentales para construir circuitos lógicos complejos.

Un ejemplo de puerta cuántica de múltiples qubits es la puerta CNOT, la cual tiene dos qubits de entrada: el qubit de control y el qubit objetivo. La Figura 1.2 representa un circuito formado por una puerta CNOT en la cual el qubit de control se encuentra en la línea superior y el qubit objetivo en la línea inferior. La acción de la compuerta CNOT es condicional: si el qubit de control está en el estado $|0\rangle$, el qubit objetivo permanece inalterado; si el qubit de control está en el estado $|1\rangle$, el qubit objetivo se invierte. Esta operación puede verse como una generalización de la puerta XOR clásica.

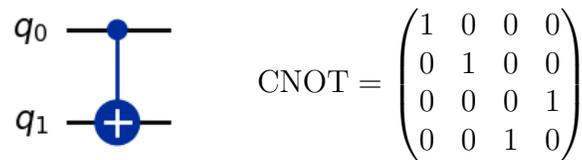


Figura 1.2: Puerta cuántica CNOT.

Al tratarse de matrices unitarias, estas transformaciones son reversibles, a diferencia de muchas puertas clásicas que son intrínsecamente irreversibles. Por ejemplo, la compuerta clásica AND pierde información sobre los valores de entrada originales. Esta propiedad de reversibilidad es fundamental para la computación cuántica, la cual sugiere que el diseño de algoritmos cuánticos implica nuevas formas de pensar sobre la lógica y el procesamiento de la información.

Además de la compuerta CNOT, existen muchas otras puertas cuánticas de múltiples qubits que juegan un papel importante en la computación cuántica. Sin embargo, la combinación de puertas CNOT y puertas de un solo qubit es suficiente para construir cualquier operación cuántica.

1.5. Circuitos cuánticos

Los circuitos cuánticos son una herramienta de la computación cuántica que permiten la visualización y el diseño de operaciones complejas. Un circuito cuántico se representa con líneas horizontales que indican los qubits y puertas cuánticas a lo largo del tiempo. A diferencia de los circuitos clásicos, los circuitos cuánticos no permiten crear bucles y todas las operaciones deben ser unitarias y reversibles, es decir, cada transformación aplicada a los qubits debe preservar la norma del estado cuántico y permitir la inversión del proceso mediante otra transformación. Además, no es posible copiar qubits debido a las restricciones de la mecánica cuántica.

Una característica importante de los circuitos cuánticos es la capacidad de realizar operaciones controladas, como se ha visto anteriormente con las puertas cuánticas de múltiples qubits. Otra característica fundamental es la medición, que convierte un estado cuántico en un bit clásico probabilístico, indicando el colapso del estado del qubit.

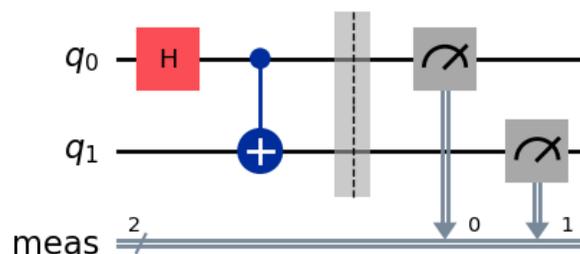


Figura 1.3: Circuito cuántico con dos qubits y dos puertas cuánticas.

En el circuito cuántico de la Figura 1.3, una puerta Hadamard (1.8) se aplica sobre el primer qubit, creando una superposición de estados. Luego, una puerta CNOT usa el primer qubit como control para invertir el estado del segundo qubit, generando un entrelazamiento entre los dos qubits. Finalmente, ambos qubits son medidos, proporcionando resultados clásicos que reflejan el estado final del sistema.

1.6. Ordenadores cuánticos

Los cambios que ocurren en un estado cuántico pueden describirse utilizando el lenguaje de la computación cuántica mediante los ordenadores cuánticos. De manera análoga a cómo un ordenador clásico se construye a partir de un circuito eléctrico que contiene puertas lógicas, un ordenador cuántico se construye a partir de un circuito cuántico que contiene puertas cuánticas empleadas para transportar y manipular la información.

La implementación práctica de un ordenador cuántico enfrenta desafíos significativos debido a la necesidad de mantener la coherencia cuántica de los qubits. La coherencia cuántica se refiere a la propiedad de los sistemas cuánticos de mantener una relación de fase bien definida entre diferentes estados. Esta coherencia está limitada por el fenómeno de la decoherencia, causado por interacciones externas. Este fenómeno determina la duración máxima de computación, ya que representa la pérdida de la información cuántica necesaria para realizar cálculos precisos. Algunos métodos de almacenamiento de qubits para maximizar su coherencia y reducir interferencias incluyen mantener temperaturas cercanas al cero absoluto o utilizar cámaras de vacío.

Diversos sistemas físicos se han propuesto como candidatos para manejar información cuántica. Las tecnologías de qubits más utilizadas son los qubits de iones atrapados, los qubits superconductores o los qubits topológicos.

1.7. Ventajas de la computación cuántica

Los ordenadores cuánticos representan un avance significativo sobre los ordenadores tradicionales debido a su capacidad de aprovechar las propiedades de la mecánica cuántica como el principio de superposición cuántica o el entrelazamiento cuántico. A medida que los problemas crecen en tamaño y complejidad, la eficiencia de los algoritmos tradicionales a menudo se ve limitada por el crecimiento exponencial en la cantidad de recursos necesarios para resolverlos. Por ejemplo, la factorización de números grandes es un problema clásico que, en teoría, podría ser abordado más eficientemente por un ordenador cuántico utilizando algoritmos cuánticos. [6]

La clasificación de un algoritmo se fundamenta en cómo aumentan los recursos necesarios conforme crece el tamaño del problema estudiado, siendo esta complejidad crucial para determinar su eficiencia y capacidad de resolver problemas a gran escala. Mientras que los ordenadores clásicos enfrentan limitaciones con algoritmos cuya complejidad crece de manera exponencial respecto al tamaño del problema, los ordenadores cuánticos prometen algoritmos con una complejidad potencialmente más manejable.

Los algoritmos cuánticos, teóricamente, tienen la capacidad de resolver problemas que hoy en día son intratables para los ordenadores tradicionales, como la factorización de grandes números usados en la criptografía moderna. En efecto, gran parte de la encriptación en internet se sustenta en la idea de que factorizar un número RSA de 617 dígitos es inmanejable para un ordenador clásico.

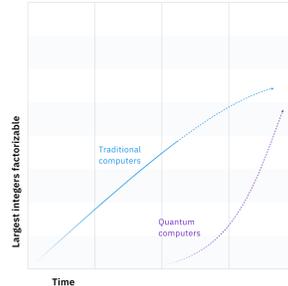


Figura 1.4: Tamaño de los mayores enteros factorizables en función del tiempo. La capacidad de factorización se representa en función del tiempo necesario para resolver estos problemas. [6]

1.8. Situación actual

Actualmente, los ordenadores cuánticos enfrentan dos limitaciones principales. La primera es la capacidad de almacenamiento y procesamiento de datos, la cual depende del número de qubits del sistema. La segunda es la tasa de error, ya que los ordenadores cuánticos actuales son propensos a introducir ruido en los resultados debido a la decoherencia. Por estas razones, los ordenadores convencionales siguen siendo más rápidos y eficientes que los cuánticos en la resolución de problemas complejos.

Sin embargo, se espera que en el futuro esta situación cambie, posibilitando la resolución más rápida de problemas complejos como la factorización de un número RSA de 617 dígitos utilizando ordenadores cuánticos. Las estimaciones indican que, para lograr factorizar dicho número en menos de un día, se requerirían aproximadamente 20 millones de qubits ruidosos. [7] Por lo tanto, dado que los ordenadores cuánticos más potentes en la actualidad apenas superan los 1000 qubits ruidosos, se necesitarán avances significativos en la tecnología de la computación cuántica para alcanzar este nivel de rendimiento.

1.9. Qiskit

Qiskit [8] es una biblioteca de código abierto desarrollada por *IBM* para computación cuántica, basada en *Python*. Esta biblioteca permite diseñar y ejecutar circuitos cuánticos en ordenadores cuánticos reales o en simulaciones que replican el comportamiento de uno de estos ordenadores. Antes de ejecutar estos circuitos cuánticos en un ordenador cuántico real, pueden simularse en un ordenador clásico para poder validar su correcto funcionamiento. *Qiskit* también permite enviar los circuitos para ser ejecutados en ordenadores cuánticos reales a través de *IBM Quantum Platform* [9], que ofrece acceso a procesadores cuánticos reales de *IBM*.

1.9.1. *Qiskit Nature*

Qiskit Nature [10] es una biblioteca enfocada en la resolución de sistemas cuánticos. Entre sus diversas funcionalidades, permite encontrar estados fundamentales y excitados de problemas de estructuras electrónicas y vibracionales o medir los momentos dipolares de sistemas moleculares. También permite cargar datos desde controladores químicos, construir y manipular operadores de segunda cuantización o traducir el espacio de segunda cuantización al espacio de qubits.

1.9.2. *Qiskit Algorithms*

Qiskit Algorithms [11] es una biblioteca enfocada en algoritmos cuánticos. La biblioteca incluye algunos algoritmos, como el *NumPyMinimumEigensolver* o el *VQE. NumPyMinimumEigensolver* toma los mismos parámetros de entrada que los algoritmos cuánticos pero resuelve los problema de manera clásica. Este algoritmo puede ser empleado para validar los resultados obtenidos con los algoritmos cuánticos. *VQE* es un algoritmo híbrido, que emplea un ordenador clásico y otro cuántico. En el capítulo 2, se discute con más detalle su funcionamiento y uso mediante *Qiskit*. Además, esta biblioteca dispone de optimizadores clásicos como *COBYLA*, *SLSQP* o *SPSA* para usar con el algoritmo *VQE*.

1.9.3. *Qiskit Aer*

Qiskit Aer [12] es una biblioteca enfocada en las simulaciones de computación cuántica de alto rendimiento con modelos de ruido realistas. Es empleada para ejecutar circuitos cuánticos con o sin ruido mediante múltiples métodos de simulación. También permite establecer los ajustes de ejecución del algoritmo *VQE*.

1.9.4. *Qiskit IBM Runtime*

Qiskit IBM Runtime [13] es un entorno ofrecido por *IBM Quantum Platform* [9] empleado para aumentar la eficiencia de los cálculos y proporcionar implementaciones óptimas de herramientas básicas de *Qiskit*. Con este entorno, se puede acceder a los modelos de ruido de algunos ordenadores cuánticos de *IBM*, los cuales pueden ser implementados en los algoritmos para realizar simulaciones con ruido.

1.10. *IBM Quantum Platform*

IBM Quantum Platform [9] es una plataforma en la nube ofrecida por *IBM* que proporciona acceso a recursos y herramientas de computación cuántica. La plataforma ofrece varios servicios, incluyendo acceso a varios procesadores cuánticos reales de *IBM* y simuladores cuánticos de alto rendimiento. Actualmente, el procesador cuántico más potente disponible en *IBM Quantum Platform* es el procesador *Eagle*, el cual consta de 127 qubits. Además, la plataforma proporciona simuladores cuánticos avanzados que pueden replicar el comportamiento de procesadores cuánticos reales, lo cual permite a los usuarios desarrollar y probar algoritmos cuánticos sin necesidad de emplear hardware especializado.

Capítulo 2

Algoritmos de computación cuántica

La química computacional es uno de los campos que se podría beneficiarse de los avances en los ordenadores cuánticos. Esta expectativa surge del crecimiento exponencial de la complejidad de los sistemas con el aumento del número de orbitales en los sistemas estudiados, lo cual hace que los tiempos de ejecución en los ordenadores clásicos aumenten exponencialmente con el tamaño del problema. Por otro lado, los ordenadores cuánticos, con su capacidad para manejar y procesar información cuántica de manera eficiente, prometen superar a los ordenadores clásicos en la simulación de moléculas complejas. Para aprovechar estas capacidades, se han desarrollado varios algoritmos cuánticos que buscan resolver estos problemas de forma más rápida y eficiente. A pesar de que los recursos y tiempos de ejecución de estos algoritmos crecen polinómicamente con el tamaño del problema, tienen un gran potencial para superar las limitaciones de los algoritmos clásicos. [14]

Uno de los algoritmos más prometedores desarrollados para este propósito es el algoritmo *VQE* (*Variational Quantum Eigensolver*). Es un algoritmo híbrido que emplea un ordenador cuántico para realizar cálculos cuánticos y un ordenador clásico para optimizar los parámetros del circuito cuántico, reduciendo así la profundidad del circuito y minimizando el ruido en los resultados. Esta combinación de técnicas clásicas y cuánticas hace que el algoritmo *VQE* sea adecuado para su implementación en los ordenadores cuánticos actuales, que todavía tienen limitaciones significativas en términos de número de qubits y coherencia.

El objetivo principal de la simulación de sistemas químicos es determinar la energía del estado fundamental y la estructura correspondiente a esta energía mínima. Para lograr esto, es esencial conocer el Hamiltoniano de la molécula.

Los Hamiltonianos que pueden ser simulados en los ordenadores cuánticos son aquellos que pueden escribirse en términos de las matrices de Pauli (1.9). Para encontrar la energía del estado fundamental, el Hamiltoniano debe medirse en el autoestado correspondiente al menor autovalor. Por lo tanto, el desafío radica en expresar el Hamiltoniano del sistema en términos de las matrices de Pauli, encontrar la energía del estado fundamental y medir el valor esperado del Hamiltoniano en ese estado específico. En este capítulo, se explorará en profundidad el algoritmo *VQE*, proporcionando una visión detallada de su funcionamiento, sus componentes y su implementación práctica con *Qiskit*.

2.1. VQE

El algoritmo *VQE*, presentado por primera vez en 2014 [15], es un algoritmo híbrido, donde algunos procesos se realizan en un ordenador cuántico y otros en un ordenador clásico, lo cual permite realizar cálculos con un pequeño número de qubits. Este algoritmo está basado en el principio variacional, y más concretamente en el funcional de Rayleigh-Ritz, el cual optimiza un límite superior para el valor esperado más bajo posible de un observable con respecto a una función de onda de prueba. Es decir, dado un Hamiltoniano, \hat{H} , y una función de onda de prueba, $|\psi\rangle$, la energía del estado fundamental asociada con este Hamiltoniano, E_0 , está acotada por

$$E_0 \leq \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (2.1)$$

El objetivo del algoritmo *VQE* es encontrar una parametrización de $|\psi\rangle$ que minimice el valor esperado del Hamiltoniano. Este valor esperado forma un límite superior para la energía del estado fundamental. En términos matemáticos, se busca encontrar una aproximación al autovector $|\psi\rangle$ del operador hermítico \hat{H} correspondiente al autovalor más bajo, E_0 . [16]

Para traducir la anterior minimización en un problema que se pueda ejecutar en un ordenador cuántico, se define una función de onda de prueba, o *ansatz*, la cual se puede implementar en un dispositivo cuántico como una serie de puertas cuánticas parametrizadas. El *ansatz* es una estructura parametrizada empleada para aproximar el estado cuántico deseado, en consecuencia, su elección adecuada afecta directamente a la calidad de la solución y la eficiencia del proceso de optimización.

Por lo tanto, $|\psi\rangle$ se expresa como la aplicación de una unidad parametrizada genérica $U(\theta)$ a un estado inicial para N qubits. Siendo θ un conjunto de parámetros que toman valores en $(-\pi, \pi]$. El registro de qubits generalmente se inicializa como $|0\rangle^{\otimes N}$, escrito como $|0\rangle$ para simplificar. Tomando $|\psi\rangle$ como una función de onda normalizada, el problema de optimización del algoritmo *VQE*, o función de coste, puede definirse como

$$E_{VQE} = \min_{\theta} \langle 0 | U^\dagger(\theta) \hat{H} U(\theta) | 0 \rangle \quad (2.2)$$

Para que \hat{H} pueda ser medido directamente desde un ordenador cuántico, debe ser escrito como una suma ponderada de operadores de espín. Los observables adecuados para la medición directa en un dispositivo cuántico son productos tensoriales de operadores de Pauli, definidos como

$$\hat{P}_a \in \{I, X, Y, Z\}^{\otimes N} \quad (2.3)$$

Siendo N el número de qubits utilizados para modelar la función de onda, I la matriz identidad y (X, Y, Z) las matrices de Pauli. Con todo esto, \hat{H} se puede reescribir como

$$\hat{H} = \sum_a^{\mathcal{P}} \alpha_a \hat{P}_a \quad (2.4)$$

Siendo α_a los pesos y \mathcal{P} el número de productos tensoriales de operadores de Pauli en el Hamiltoniano. Mediante la Ecuación (2.4), la Ecuación (2.2) puede reescribirse como

$$E_{VQE} = \min_{\theta} \sum_a^{\mathcal{P}} \alpha_a \langle 0 | U^\dagger(\theta) \hat{P}_a U(\theta) | 0 \rangle = \min_{\theta} \sum_a^{\mathcal{P}} E_{\hat{P}_a} \quad (2.5)$$

Donde cada término $E_{\hat{P}_a}$ corresponde al valor esperado de un producto tensorial de operadores de Pauli, \hat{P}_a , y puede calcularse mediante un ordenador cuántico. Por otro lado, la suma y la minimización de E_{VQE} puede llevarse a cabo en un ordenador clásico. Demostrando así la naturaleza híbrida del algoritmo *VQE*.

Para poder definir el algoritmo *VQE* en *Qiskit*, se necesitan tres elementos esenciales: un *estimator*, un *ansatz* y un optimizador clásico.

2.1.1. Estimator

Un *estimator* en *Qiskit* es una herramienta que permite calcular el valor esperado de un operador, como un Hamiltoniano, sobre un estado cuántico específico. En el contexto del *VQE*, el *estimator* se utiliza para evaluar el valor esperado del Hamiltoniano para las diferentes configuraciones de los parámetros del circuito cuántico. [12]

AerEstimator es un *estimator* proporcionado por *Qiskit Aer*, el cual emplea un proceso de muestreo. Al ejecutar el circuito cuántico, el resultado tiene un componente de ruido debido al proceso de muestreo. El comportamiento de este *estimator* puede ser configurado con diferentes parámetros, como la semilla o el número de *shots*.

La semilla es un valor empleado para iniciar el generador de números aleatorios, lo cual es importante para garantizar que los resultados de las simulaciones sean reproducibles. Por otro lado, el número de *shots* se refiere al número de veces que se ejecuta el circuito cuántico para obtener un valor esperado del Hamiltoniano. Un mayor número de *shots*, generalmente, proporciona una estimación más precisa.

Además, *Qiskit Aer* permite incorporar modelos de ruido basados en las propiedades de dispositivos cuánticos reales de *IBM*. Esto es particularmente útil para simular cómo un algoritmo podría comportarse en un hardware cuántico real, proporcionando una visión más realista del rendimiento del algoritmo *VQE* en condiciones prácticas.

2.1.2. Ansatz

El *ansatz* es la estructura del circuito cuántico parametrizado, utilizado para producir el estado de prueba con el cual se mide el Hamiltoniano. Los aspectos clave del *ansatz* son su capacidad de expresión y de entrenamiento. La capacidad de expresión define la habilidad del *ansatz* para abarcar una amplia clase de estados en el espacio de Hilbert, determinando la precisión máxima que puede alcanzar al aproximar los estados de baja energía relevantes. La capacidad de entrenamiento describe la capacidad del *ansatz* para ser optimizado en dispositivos cuánticos. [16]

Un buen *ansatz* debe ser lo suficientemente expresivo para garantizar que se pueda aproximar adecuadamente la función de onda del estado fundamental, pero no debe ser tan complejo que haga inabordable la búsqueda del estado objetivo. Otro aspecto importante en la elección del *ansatz* es la escalabilidad y la complejidad de la profundidad del circuito con respecto al tamaño del sistema. Esto es especialmente crucial para la aplicación del algoritmo *VQE*, ya que determina en gran medida su resistencia al ruido.

Existe una amplia gama de *ansätze* posibles, y la elección adecuada depende del problema que se esté abordando. Entre los *ansätze* empleados a lo largo del trabajo, se encuentran el *ansatz UCCSD*, proporcionado por *Qiskit Nature*, y el *ansatz TwoLocal*, proporcionado por *Qiskit*.

UCCSD (Unitary Coupled-Cluster Single and Double excitations) [17] es un *ansatz* basado en el método clásico de acoplamiento de *clusters*, un método numérico empleado para describir sistemas de muchos cuerpos, ampliamente utilizado en algoritmos cuánticos. En este *ansatz*, cada parámetro representa una amplitud de acoplamiento de *clusters* para cada excitación fermiónica desde un estado de referencia, ya sea una excitación simple o doble.

El *ansatz UCCSD* genera estados que corresponden a funciones de onda electrónicas realistas, facilitando su optimización. Sin embargo, cuando se aplica a moléculas grandes, puede incluir muchas excitaciones innecesarias, lo que resulta en un gran número de parámetros a optimizar y circuitos excesivamente complejos. Este problema surge debido a que la generación del *ansatz* se basa únicamente en el número de orbitales y electrones, sin tener en cuenta información específica del sistema químico, como la geometría o la simetría del grupo puntual. [18]

A pesar de estas limitaciones, el *ansatz UCCSD* sigue siendo eficaz para determinar los autoestados del estado fundamental a partir de un estado de referencia de Hartree-Fock, lo que lo convierte en una herramienta importante para realizar cálculos de estructura electrónica. [19]

Por otro lado, el *ansatz TwoLocal* es un circuito parametrizado compuesto por capas alternas de rotación y de entrelazamiento. Las capas de rotación consisten en puertas de un solo qubit que se aplican a todos los qubits del circuito. Las capas de entrelazamiento siguen una estrategia definida de entrelazamiento, empleando para ello puertas de dos qubits. [8]

2.1.3. Optimizador

El optimizador es el componente clásico del algoritmo. Su función se basa en ajustar los parámetros del circuito cuántico para minimizar la función de coste, que en el caso del algoritmo *VQE* es el valor esperado de la energía del Hamiltoniano. El proceso de optimización se realiza en un ordenador clásico y es esencial para encontrar la mejor aproximación del estado fundamental del sistema.

Optimizar los parámetros de un *ansatz* cuántico variacional es un problema *NP-hard*, es decir, no existen algoritmos que puedan dar una solución exacta en tiempo polinomial, pero si se conoce la solución, es fácil verificar el resultado. [20] Por este motivo, se requieren estrategias de optimización eficientes que proporcionen una solución aproximada en un número manejable de iteraciones. A continuación se describen alguno de los optimizadores disponibles en *Qiskit Algorithms*.

COBYLA (Constrained Optimization By Linear Approximation) [21] es un método numérico de optimización que no está basado en gradientes, donde el problema con restricciones se aproxima iterativamente mediante problemas de programación lineal. Cada iteración implica resolver un problema lineal aproximado para obtener la siguiente estimación. Al no requerir evaluación de gradientes, su rendimiento mejora en situaciones con ruido. [22]

SPSA (Simultaneous Perturbation Stochastic Approximation) [23] es un optimizador basado en gradientes, que proporciona una técnica de optimización de sistemas con múltiples parámetros desconocidos, particularmente adecuado para problemas de alta dimensionalidad. [11] Lo más destacado del optimizador *SPSA* es la aproximación del gradiente estocástico, que requiere que la función objetivo se mida solo dos veces, independientemente del tamaño del sistema o la dimensión del problema de optimización. Esto resulta en una disminución significativa en el costo de optimización, especialmente en problemas con un gran número de parámetros variacionales. [22]

SLSQP (Sequential Least Squares Quadratic Programming) [24] minimiza una función de varias variables con cualquier combinación de límites, restricciones de igualdad y desigualdad. Este optimizador es particularmente adecuado para problemas matemáticos en los que la función objetivo y las restricciones son dos veces continuamente diferenciables. [11] *SLSQP* es un optimizador muy eficiente, pero es muy susceptible al ruido. [22]

2.2. Preparación del Hamiltoniano

En esta sección, se muestra el proceso de preparación del Hamiltoniano molecular (2.6), ya que forma parte de uno de los sistemas estudiados posteriormente. Para la preparación del resto de sistemas se sigue un proceso análogo al explicado desde la Ecuación (2.7).

Para que el Hamiltoniano molecular pueda ser medido directamente desde un ordenador cuántico, debe ser escrito en términos de las matrices de Pauli (1.9).

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_n + \hat{V}_{ne} + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{nn} \quad (2.6)$$

Siendo \hat{T}_e el operador de energía cinética para cada electrón del sistema, \hat{T}_n el operador de energía cinética para cada núcleo, \hat{V}_{ne} el operador de energía potencial entre los electrones y los núcleos debida a la interacción de Coulomb, \hat{V}_{nn} el operador de energía potencial entre los núcleos y \hat{V}_{ee} el operador de energía potencial entre los electrones. [16]

En un entorno no relativista y siguiendo la aproximación de Born-Oppenheimer, la cual asume que el movimiento de los núcleos puede ser despreciado, ya que son mucho más pesados que los electrones, el Hamiltoniano electrónico depende de forma paramétrica de las posiciones nucleares. A excepción de una constante, dada por la energía de repulsión entre los núcleos, el Hamiltoniano electrónico puede expresarse como

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{V}_{ne} + \hat{V}_{nn} = - \sum_i \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{i,j} \frac{Z_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (2.7)$$

Donde \mathbf{r}_i es la posición del electrón i , Z_j el número atómico del núcleo j .

Con esta aproximación, el sistema se reduce a un problema de electrones en interacción representado en términos de primera cuantización. Sin embargo, es fundamental representarlo en términos de segunda cuantización, ya que esto permite imponer la antisimetría a través de la construcción de sus operadores. Además, facilita la transformación de este Hamiltoniano a operadores de qubits mediante técnicas de transformación como la de Jordan-Wigner. Esta representación es esencial para aprovechar al máximo las capacidades de procesamiento de los ordenadores cuánticos en la simulación de sistemas químicos complejos.

Por lo tanto, una vez obtenida la Ecuación (2.7) del Hamiltoniano molecular, el siguiente paso es representarlo en términos de segunda cuantización. Luego, se realiza una transformación de operadores fermiónicos a operadores de qubits. Una vez completados todos estos pasos, el resultado final es el Hamiltoniano del sistema expresado en términos de las puertas de Pauli.

2.2.1. Segunda cuantización

La segunda cuantización proporciona una notación básica para formular sistemas de muchas partículas. [25] Comenzando con las funciones de onda, $|\phi_\lambda\rangle$, y sus correspondientes autovalores, ϵ_λ , el Hamiltoniano de partícula individual, \hat{H} , viene dado por

$$\hat{H}|\phi_\lambda\rangle = \epsilon_\lambda|\phi_\lambda\rangle \quad (2.8)$$

Cuando un sistema de N partículas es afectado por este Hamiltoniano, la solución general es una simetrización o antisimetrización del producto tensorial de funciones.

Los electrones, al ser fermiones, son representados por estados antisimétricos. Su función de onda corresponde con el determinante de Slater (2.9).

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |\lambda_1\rangle_1 & |\lambda_2\rangle_1 & \cdots & |\lambda_N\rangle_1 \\ |\lambda_1\rangle_2 & |\lambda_2\rangle_2 & \cdots & |\lambda_N\rangle_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ |\lambda_1\rangle_N & |\lambda_2\rangle_N & \cdots & |\lambda_N\rangle_N \end{vmatrix} \quad (2.9)$$

Donde $|\lambda_i\rangle_j$ representa la partícula i en el estado j . En general, $|\lambda_i\rangle_i$ denota un orbital de spin. [14]

Por otro lado, existe otra manera de representar $|\psi\rangle$ en función del número de partículas que se encuentran en cada estado, denotado como base de ocupación (2.10).

$$|\psi\rangle = |\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N\rangle \quad (2.10)$$

Donde, para el caso de los fermiones, $\lambda_i \in \{0, 1\}$ debido al principio de exclusión de Pauli, tomando un valor de 0 si el orbital i se encuentra desocupado y 1 si se encuentra ocupado. Esta representación se puede codificar fácilmente en el registro de qubits, con un orbital de espín ocupado denotado por $|1\rangle$ y un orbital desocupado por $|0\rangle$. [16]

El subespacio abarcado por estos estados antisimétricos se conoce como el espacio de Fock. En el caso de tener un espacio de Fock de N orbitales, estará abarcado por 2^N estados. Es notable destacar que el número de estados de N qubits también es 2^N , lo cual da lugar transformar este espacio de Fock a un espacio de N qubits. [14]

Con esta nueva notación, se define el estado de vacío, $|\Omega\rangle$, junto a los operadores de creación, \hat{a}_i^\dagger , y destrucción, \hat{a}_i .

$$|\Omega\rangle = |0, 0, \dots, 0\rangle \quad (2.11)$$

$$\hat{a}_i^\dagger |\lambda_1, \dots, \lambda_{N-i}, 0, \lambda_{N+i}, \dots, \lambda_N\rangle = (-1)^{\sum_{s=0}^{i-1} \lambda_s} |\lambda_1, \dots, \lambda_{N-i}, 1, \lambda_{N+i}, \dots, \lambda_N\rangle \quad (2.12)$$

$$\hat{a}_i^\dagger |\lambda_1, \dots, \lambda_{N-i}, 1, \lambda_{N+i}, \dots, \lambda_N\rangle = 0 \quad (2.13)$$

$$\hat{a}_i |\lambda_1, \dots, \lambda_{N-i}, 1, \lambda_{N+i}, \dots, \lambda_N\rangle = (-1)^{\sum_{s=0}^{i-1} \lambda_s} |\lambda_1, \dots, \lambda_{N-i}, 0, \lambda_{N+i}, \dots, \lambda_N\rangle \quad (2.14)$$

$$\hat{a}_i |\lambda_1, \dots, \lambda_{N-i}, 0, \lambda_{N+i}, \dots, \lambda_N\rangle = 0 \quad (2.15)$$

Físicamente, el operador \hat{a}_i^\dagger crea una partícula en el estado λ_i mientras que el operador \hat{a}_i la destruye. Es preciso recalcar que no todas las combinaciones de operadores producen un estado válido para el caso fermiónico. Por otro lado, para que no exista conflicto con la simetría de la función de onda, estos operadores deben cumplir las siguientes relaciones de anticonmutación. [25]

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \quad \{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = 0, \quad \{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\} = 0 \quad (2.16)$$

En la segunda cuantización, se impone la antisimetrización a través de la construcción de los operadores \hat{a}_i^\dagger y \hat{a}_i . Cualquier operador en el espacio de Fock puede expresarse como una combinación lineal de productos de operadores de creación y destrucción, también conocidos como operadores fermiónicos. Dado que el Hamiltoniano (2.7) es un operador que actúa en el espacio de Fock, puede reescribirse en términos de los operadores \hat{a}_i^\dagger y \hat{a}_i . [14]

$$\hat{H} = \sum_{p,q} h_{pq} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q + \frac{1}{2} \sum_{p,q,r,s} g_{pqrs} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_r \hat{a}_s \quad (2.17)$$

Donde h_{pq} es la integral de un cuerpo (2.18) y g_{pqrs} la integral de dos cuerpos (2.19). En el capítulo 6, se ha estudiado la equivalencia del Hamiltoniano de un sistema de dos partículas obtenido mediante los estados de la base del Hamiltoniano individual y mediante la segunda cuantización.

$$h_{pq} = \langle \lambda_p | \hat{T}_e + \hat{V}_{ne} | \lambda_q \rangle = \int d\mathbf{x} \lambda_p^*(\mathbf{x}) \left(-\frac{1}{2} \nabla^2 - \sum_j \frac{Z_j}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_j|} \right) \lambda_q(\mathbf{x}) \quad (2.18)$$

$$g_{pqrs} = \langle \lambda_p \lambda_q | \hat{V}_{ee} | \lambda_r \lambda_s \rangle = \iint d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \frac{\lambda_p^*(\mathbf{x}_1) \lambda_q^*(\mathbf{x}_2) \lambda_r(\mathbf{x}_2) \lambda_s(\mathbf{x}_1)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (2.19)$$

Con todo esto, el Hamiltoniano puede expresarse en términos de los operadores fermiónicos \hat{a}_i^\dagger y \hat{a}_i .

2.2.2. Transformación de operadores fermiónicos a operadores de qubits

Dado que el algoritmo *VQE* solo puede tomar operadores de qubits como entrada, es necesario transformar el Hamiltoniano, originalmente expresado en términos de operadores fermiónicos, a operadores de qubits. Existen varias técnicas para llevar a cabo esta transformación, siendo una de las más comunes la transformación de Jordan-Wigner.

La transformación de Jordan-Wigner [26] se basa en el formalismo de la base de ocupación, donde el estado de cada qubit denota si un orbital se encuentra ocupado o desocupado. Para ello, se emplean N qubits para almacenar el número de ocupación de los N orbitales. [14] [27]

$$|\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N\rangle \rightarrow |q_N\rangle \dots \otimes |q_2\rangle \otimes |q_1\rangle \quad (2.20)$$

El estado de cada qubit, $|q_i\rangle$, será denotado por $|1\rangle$ si el orbital se encuentra ocupado o por $|0\rangle$ si se encuentra desocupado. Con esta notación, es necesario definir los operadores de creación y destrucción en el espacio de qubits, realizando las siguientes operaciones que afecten a los estados de los qubits.

$$\hat{Q}^\dagger|0\rangle = |1\rangle, \quad \hat{Q}^\dagger|1\rangle = 0, \quad \hat{Q}|0\rangle = 0, \quad \hat{Q}|1\rangle = |0\rangle \quad (2.21)$$

Tomando los estados $|0\rangle$ y $|1\rangle$ como

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

Los operadores de creación, \hat{Q}^\dagger , y destrucción, \hat{Q} , pueden definirse en el espacio de qubits en términos de las matrices de Pauli.

$$\hat{Q}^\dagger = |1\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(X - iY), \quad \hat{Q} = |0\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(X + iY) \quad (2.23)$$

Sin embargo, para relacionar estos operadores del espacio de qubits con los operadores en el espacio de ocupación también tienen que cumplir con las reglas de anticonmutación (2.16). Para que estas relaciones se cumplan, se debe calcular la paridad de los números de ocupación de los orbitales con índice menor que i y se debe introducir un cambio de fase cuando la paridad sea impar. Esto se logra realizando una secuencia de operaciones de Pauli Z en los qubits precedentes.

$$\hat{a}_i^\dagger \rightarrow \hat{Q}_i^\dagger \otimes_{j<i} Z_j = \frac{1}{2}(X_i - iY_i) \otimes_{j<i} Z_j \quad (2.24)$$

$$\hat{a}_i \rightarrow \hat{Q}_i \otimes_{j<i} Z_j = \frac{1}{2}(X_i + iY_i) \otimes_{j<i} Z_j \quad (2.25)$$

El principal inconveniente de esta transformación es que el número de puertas Z necesarias escala como $\mathcal{O}(N)$, es decir, linealmente con el tamaño del sistema.

Capítulo 3

Molécula de hidrógeno

En este capítulo y en los que vienen a continuación, se muestran los resultados de las simulaciones realizadas para los diferentes sistemas cuánticos seleccionados.¹ Estos sistemas han sido estudiados mediante simulaciones de algoritmos de computación cuántica en un ordenador clásico mediante *Qiskit* [8].

Los principales objetivos de estos capítulos se centran en la comprensión del funcionamiento de los ordenadores cuánticos y en la comparación del rendimiento de los algoritmos clásicos frente a los cuánticos. Para ello, se han estudiado problemas de diferentes complejidades. Además, se busca analizar las limitaciones actuales de la computación cuántica y su potencial para resolver problemas complejos en diversos ámbitos científicos.

En este capítulo, se analizan los resultados obtenidos para las simulaciones de la molécula de hidrógeno realizadas mediante el algoritmo *VQE* de *Qiskit Algorithms*, estudio similar al realizado en [14]. Para la modelación y resolución de este sistema, se ha empleado la librería *Qiskit Nature*.

Mediante el uso del *driver* químico *PySCFDriver* y la transformación de Jordan-Wigner de la librería *Qiskit Nature* [10], se ha obtenido el Hamiltoniano del sistema de la molécula de hidrógeno expresado en términos de la matriz identidad y de las matrices de Pauli (1.9).

Una vez obtenido el hamiltoniano en términos de las matrices de Pauli, se han empleado dos algoritmos diferentes para obtener la energía del estado fundamental del sistema: el algoritmo clásico *NumPyMinimumEigensolver* y el algoritmo cuántico *VQE*, obtenidos a partir de la librería *Qiskit Algorithms* [11]. Para realizar estas simulaciones, las librerías *Qiskit Nature* [10] y *Qiskit Aer* [12] han sido empleadas, respectivamente, para obtener la energía del estado fundamental con el algoritmo *NumPyMinimumEigensolver* y para establecer ciertos parámetros del algoritmo *VQE*.

En las siguientes secciones, se han realizado diferentes estudios. Primero, se ha estudiado el uso de diferentes *ansatz*, optimizadores y número de *shots* para las simulaciones realizadas con el algoritmo *VQE*. En la segunda parte, se han añadido modelos de ruido de ordenadores cuánticos reales a las simulaciones del algoritmo para poder comprobar su afecto en los resultados obtenidos.

¹Los códigos desarrollados y los resultados obtenidos en las simulaciones se encuentran en el siguiente repositorio: <https://github.com/juan-gomez-mazorra-uc/TFG.git>.

3.1. Estudio de los diferentes parámetros del algoritmo *VQE*

En esta sección, se realizan simulaciones de la molécula de hidrógeno variando distintos parámetros del algoritmo *VQE* para determinar cuáles proporcionan unos mejores resultados. Para las simulaciones realizadas, se ha variado el *ansatz*, el número de *shots* y el optimizador.²

Los *ansatz* seleccionados para realizar la comparación han sido el *ansatz UCCSD* con un estado inicial de Hartree-Fock, un *ansatz* químico de la librería *Qiskit Nature* con el cual se obtienen mejores resultados para sistemas moleculares que otros tipos de *ansatz* [14], y el *TwoLocal*, un *ansatz* más sencillo de la librería *Qiskit*. Las soluciones clásicas han sido obtenidas mediante el algoritmo *NumPyMinimumEigensolver*.

Los valores del número de *shots* empleados para realizar las simulaciones han sido 16, 128, 1024 y 16384. No se han realizado simulaciones con un número de *shots* superior ya que los tiempos de ejecución son proporcionales al número de interacciones que realiza el algoritmo.

Para realizar estas simulaciones, primero se define un Hamiltoniano de un sistema formado por dos átomos de Hidrógeno a una distancia arbitraria mediante el *driver* químico *PySCFDriver*. Con la transformación de Jordan-Wigner, se obtiene el Hamiltoniano del sistema expresado en términos de operadores de qubits para poder definir el *ansatz* a partir del número de orbitales espaciales y, en el caso del *ansatz UCCSD*, del número de partículas de dicho Hamiltoniano.

Una vez obtenido el *ansatz*, se crea el algoritmo *VQE* con los distintos parámetros del número de *shots*, el *ansatz* y el optimizador. Tras esto, se define el punto de partida del algoritmo a partir del número de parámetros del *ansatz*. Además, con la transformación de Jordan-Wigner y el algoritmo *NumPyMinimumEigensolver*, se resuelve el problema clásicamente tomando los mismos parámetros de entrada que el algoritmo *VQE* definido anteriormente.

Tras haber definido los dos algoritmos que se van a emplear, se hace un barrido de distancias de enlace entre los átomos de Hidrógeno que conforman la molécula. Para cada distancia se define el Hamiltoniano mediante el *driver* químico *PySCFDriver* y se expresa en términos de operadores de qubits con la transformación de Jordan-Wigner. Con el Hamiltoniano expresado en términos de operadores de qubits, es decir, en términos de las matrices de Pauli, se pasa como parámetro a los dos algoritmos empleados y se obtienen los valores de energía del nivel fundamental.

En las siguientes figuras, se muestra la energía del estado fundamental de la molécula de H_2 , E , en función de la distancia de enlace, d , para los diferentes casos estudiados. Estas simulaciones han sido realizadas con tres optimizadores diferentes: *COBYLA*, *SLSQP* y *SPSA*, obtenidos a partir de la librería *Qiskit Algorithms*.

²https://github.com/juan-gomez-mazorra-uc/TFG/blob/main/results/1_hydrogen/hydrogen_aer.

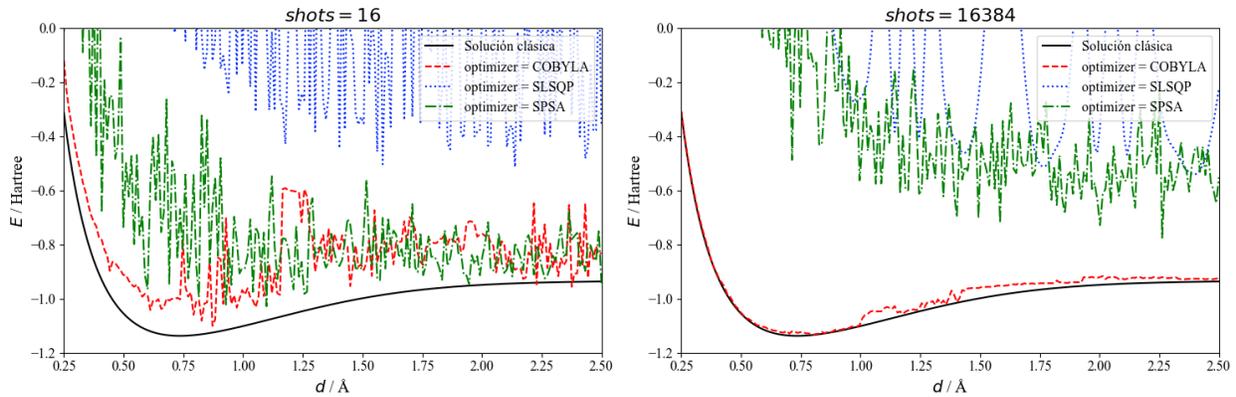


Figura 3.1: Simulación de la energía del estado fundamental de la molécula de H_2 con diferentes optimizadores y valores del número de *shots* empleando el *ansatz TwoLocal*. En la Figura A.1, se muestran estas simulaciones con distintos valores del número de *shots*.

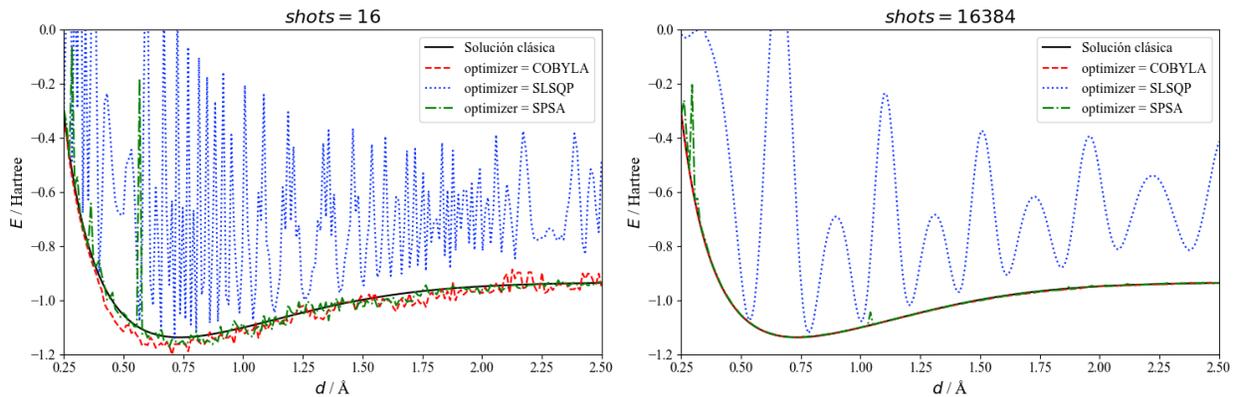


Figura 3.2: Simulación de la energía del estado fundamental de la molécula de H_2 con diferentes optimizadores y valores del número de *shots* empleando el *ansatz UCCSD*. En la Figura A.2, se muestran estas simulaciones con distintos valores del número de *shots*.

Como puede observarse en las Figuras 3.1 - 3.2, las simulaciones realizadas con el *ansatz UCCSD* son más precisas que las realizadas con el *ansatz TwoLocal*, como era de esperar debido a que *UCCSD* es un *ansatz* químico que funciona mejor para sistemas moleculares. Un motivo principal por el cual el *ansatz UCCSD* proporciona mejores resultados es su capacidad para limitar los estados de la base a aquellos en los cuales solo están presentes dos partículas, excluyendo así el resto de estados.

Por otro lado, en ambas figuras puede observarse como los optimizadores *COBYLA* y *SPSA* proporcionan unos mejores resultados, mientras que el optimizador *SLSQP* proporciona unos resultados imprecisos para ambos *ansatz* y para todos los valores del número de *shots*.

Las figuras obtenidas muestran como los resultados mejoran con el aumento del número de *shots* para los dos *ansatz* y para los optimizadores que dan unos mejores resultados, *COBYLA* y *SPSA*. Hay que tener en cuenta que, como se ha comentado anteriormente, el tiempo de ejecución aumenta con el número de *shots*.

Cabe destacar la importancia de un parámetro fundamental del algoritmo *VQE* para las simulaciones realizadas con el *ansatz UCCSD*: el punto de partida para la búsqueda del valor propio mínimo. El punto inicial puede influir en la eficiencia del algoritmo para encontrar la solución correcta. Al haber definido un estado inicial de Hartree-Fock, es necesario que todos los parámetros sean iguales a cero para que el punto de partida sea el del estado definido. Si el primer cálculo realizado es la energía de Hartree-Fock, esto proporciona una buena base de comparación y validación para el algoritmo.

En la siguiente figura, se muestra la energía del estado fundamental de la molécula de H_2 , E , en función de la distancia de enlace, d , para el caso con el *ansatz UCCSD* sin definir el punto de partida para la búsqueda del valor propio mínimo.

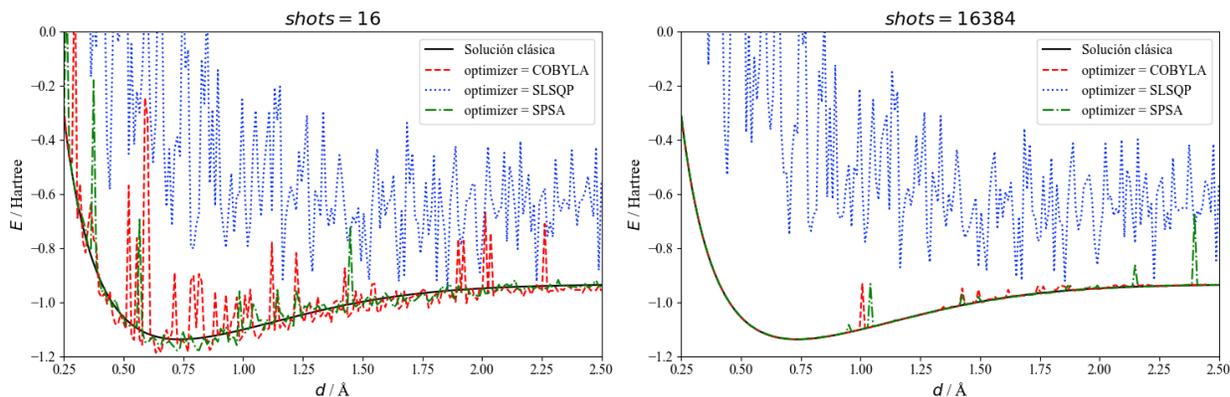


Figura 3.3: Simulación de la energía del estado fundamental de la molécula de H_2 con diferentes optimizadores y valores del número de *shots* empleando el *ansatz UCCSD* sin definir el punto de partida para la búsqueda del valor propio mínimo. En la Figura A.3, se muestran estas simulaciones con distintos valores del número de *shots*.

Comparando la Figura 3.2 con la Figura 3.3, puede observarse como lo resultados mejoran considerablemente al definir el punto de partida del algoritmo.

En la Figura 3.4, se muestra la diferencia de energía entre la solución clásica y la obtenida con cada simulación, E_{dif} , en función de la distancia de enlace, d . Solo se muestran las simulaciones realizadas en la Figura 3.2 para el *ansatz UCCSD* y los optimizadores *COBYLA* y *SPSA*, ya que son los parámetros con los cuales se han obtenido unos mejores resultados. Por otro lado, los valores medios de E_{dif} , junto a su dispersión, obtenidos en las simulaciones realizadas vienen dados en la Tabla 3.1.

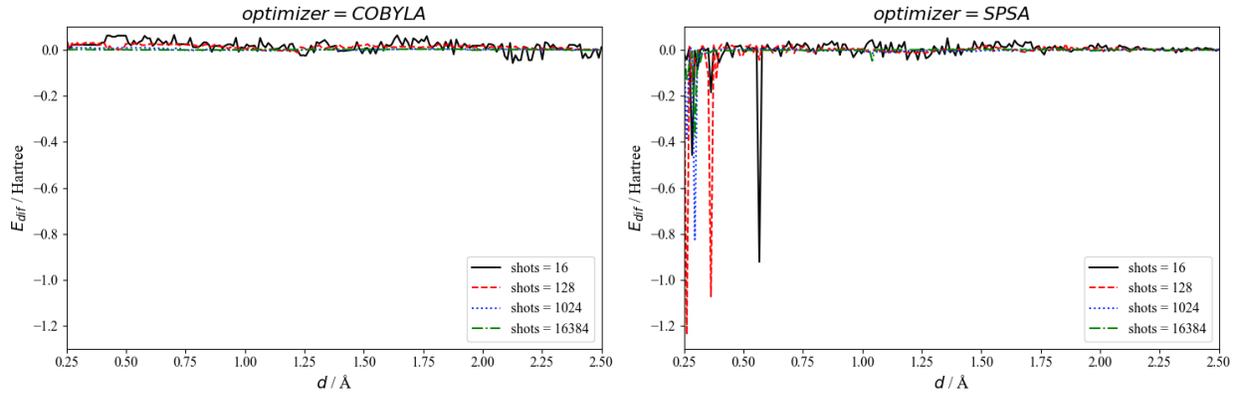


Figura 3.4: Representación gráfica de los errores de las simulaciones realizadas en la Figura 3.2 para el *ansatz UCCSD* y los optimizadores *COBYLA* y *SPSA*.

<i>optimizer</i>	<i>shots</i>	$\overline{E}_{dif}/\text{Hartree}$
<i>COBYLA</i>	16	$0,02 \pm 0,02$
<i>COBYLA</i>	128	$0,013 \pm 0,009$
<i>COBYLA</i>	1024	$0,002 \pm 0,004$
<i>COBYLA</i>	16384	$0,0009 \pm 0,0012$
<i>SPSA</i>	16	$0,00 \pm 0,08$
<i>SPSA</i>	128	$-0,01 \pm 0,12$
<i>SPSA</i>	1024	$-0,01 \pm 0,06$
<i>SPSA</i>	16384	$0,00 \pm 0,03$

Tabla 3.1: Valores medios de E_{dif} representados en la Figura 3.4.

A partir de los resultados representados en la Figura 3.4 y en la Tabla 3.1, con el objetivo de poder determinar con que optimizador se obtienen mejores resultados, en la siguiente figura se han representado los histogramas de los valores obtenidos de E_{dif} para el caso con el cual se han obtenido unos resultados más precisos, el de mayor número de *shots*.

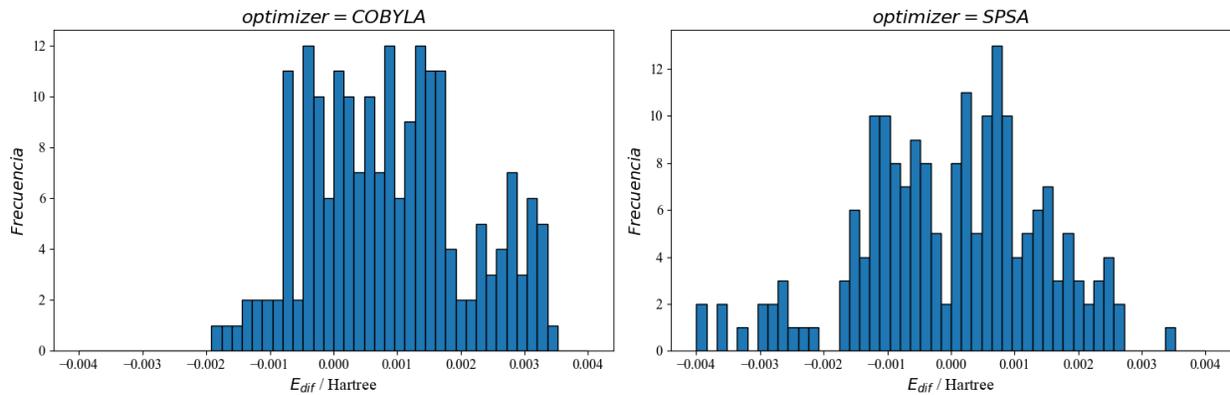


Figura 3.5: Histogramas de los errores de las simulaciones representadas en la Figura 3.2 para el *ansatz UCCSD* y los optimizadores *COBYLA* y *SPSA* con un valor de *shots* = 16384. Con el fin de facilitar una mejor comparación entre los dos casos, los valores extremos para el caso de *SPSA* no se muestran en el histograma.

Como puede observarse en la Figura 3.4, para ciertas distancias, con el optimizador *SPSA*, se obtienen unas diferencias de energía muy superiores a las obtenidas con el optimizador *COBYLA*. Además, la Tabla 3.1 y la Figura 3.5 también muestran que los resultados obtenidos con *COBYLA* tienen un valor medio con una menor dispersión para todos los casos del número de *shots* empleados. Por lo tanto, con el optimizador *COBYLA* se han obtenido unos mejores resultados que con el optimizador *SPSA*.

En la siguiente figura, se representan los histogramas de los valores de E_{diff} para el caso del *ansatz* *UCCSD* y el optimizador *COBYLA* con los diferentes valores del número de *shots*.

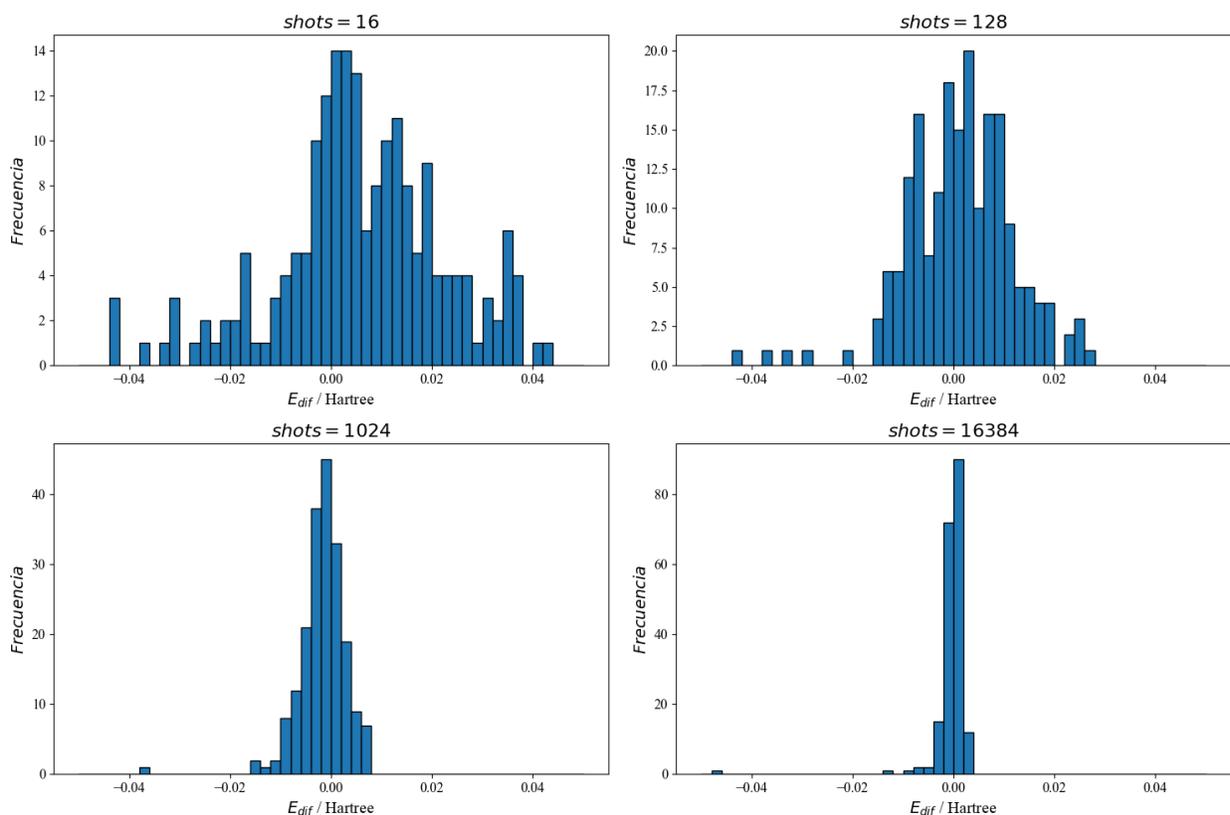


Figura 3.6: Histogramas de los errores de las simulaciones representadas en la Figura 3.2 para el *ansatz* *UCCSD* y el optimizador *COBYLA* con diferentes valores del número de *shots*. Con el fin de facilitar una mejor comparación entre los cuatro casos, los valores extremos no se muestran en el histograma.

Con los valores obtenidos en la Tabla 3.1 y observando la Figura 3.6, puede determinarse que los resultados mejoran al ir aumentando el número de *shots*. Sin embargo, los tiempos de ejecución de las simulaciones se incrementan con el aumento del número de *shots*.

A partir de los resultados obtenidos en las simulaciones, se llega a la conclusión de que los mejores resultados han sido obtenidos con el *ansatz* *UCCSD*, el optimizador *COBYLA* y un número de 16384 *shots*.

3.2. Modelos de ruido

En esta sección, se realizan simulaciones de la molécula de hidrógeno añadiendo modelos de ruido de ordenadores cuánticos de *IBM*. Estos modelos de ruido se han obtenido a partir del entorno *Qiskit IBM Runtime* [13] y de la plataforma *IBM Quantum Platform* [9]. Mediante estas herramientas, las simulaciones se configuran para imitar un *backend* de uno de los ordenadores cuánticos de *IBM* para así poder utilizar el modelo de ruido del dispositivo en las simulaciones.³

En la siguiente figura, se muestra la energía del estado fundamental de la molécula de H_2 , E , en función de la distancia de enlace, d , aplicando diferentes modelos de ruido. Estas simulaciones han sido realizadas con los parámetros que han proporcionado los mejores resultados en la sección 3.1: el *ansatz UCCSD* y el optimizador *COBYLA*.

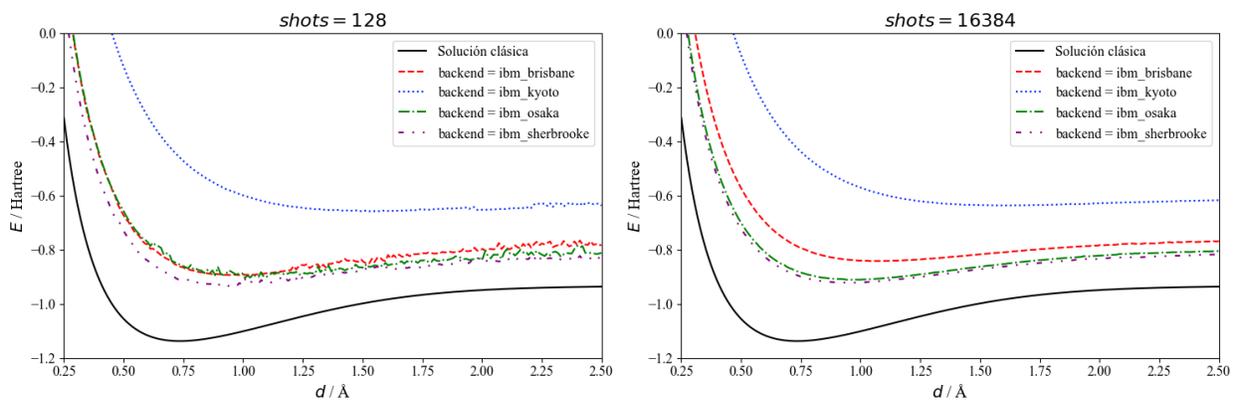


Figura 3.7: Simulación de la energía del estado fundamental de la molécula de H_2 con diferentes modelos de ruido y valores del número de *shots*, empleando el *ansatz UCCSD* y el optimizador *COBYLA*.

A partir de los datos representados en la Figura 3.7, puede obtenerse el valor de la distancia correspondiente al mínimo de energía del estado fundamental, d_{enlace} , para los diferentes casos simulados. Los valores obtenidos, para el caso con un mayor número de *shots*, vienen dados en la Tabla 3.2.

<i>backend</i>	$d_{enlace}/\text{Å}$ $\pm 0,006$	Δd_{enlace}
<i>ibm_brisbane</i>	1,041	41,44 %
<i>ibm_kyoto</i>	1,618	119,84 %
<i>ibm_osaka</i>	0,974	32,34 %
<i>ibm_sherbrooke</i>	0,962	30,71 %

Tabla 3.2: Valores de la distancia de enlace, d_{enlace} , obtenidos para el caso de 16384 *shots*. Δd_{enlace} representa el error relativo de los valores de d_{enlace} obtenidos en las simulaciones en comparación con el valor $d_{enlace} = (0,736 \pm 0,006) \text{ Å}$, obtenido a partir del algoritmo clásico de computación *NumPyMinimumEigensolver*.

³https://github.com/juan-gomez-mazorra-uc/TFG/blob/main/results/1_hydrogen/hydrogen_noise_model.

Como puede observarse en la Figura 3.7 y en la Tabla 3.2, los resultados obtenidos con los cuatro modelos de ruido son imprecisos. El *backend* que proporciona unos mejores resultados es el de *sherbrooke*, sin embargo, un error relativo superior al 30% es un error excesivamente grande como para poder considerarlo aceptable en aplicaciones prácticas. Esto sugiere que los dispositivos cuánticos actuales todavía necesitan mejoras significativas para ser empleados en cálculos de química cuántica precisos. Con un desarrollo adicional dirigido a la mitigación y corrección de errores, se podría llegar a alcanzar una precisión que sea adecuada para estudios detallados de sistemas moleculares.

Los errores de los resultados obtenidos para la distancia de enlace de la molécula de hidrógeno realizados con las simulaciones con ruido muestran las limitaciones de los ordenadores cuánticos para realizar simulaciones para sistemas moleculares. También cabe destacar que estas simulaciones se han realizado con modelos de ruido de ordenadores con procesadores cuánticos de 127 qubits, el máximo disponible en la plataforma de *IBM* [9]. Actualmente, *IBM* dispone de procesadores con más de 1000 qubits. Si las simulaciones se realizasen en ordenadores con más qubits y con ordenadores más optimizados que tengan un menor ruido, podrían obtenerse mejores resultados. Además, la selección del *ansatz* también afecta significativamente a los resultados obtenidos.

3.3. Resumen

Los resultados obtenidos en las simulaciones realizadas con el algoritmo *VQE* de la molécula de hidrógeno han demostrado que la selección del *ansatz*, el optimizador, el número de *shots* y el punto de partida del *ansatz* tiene un impacto significativo en la precisión de los resultados. Entre los *ansatz* estudiados, el *ansatz UCCSD* ha sido el que ha proporcionado unos mejores resultados debido a su complejidad y orientación hacia la resolución de sistemas químicos. En cuanto a los optimizadores, *COBYLA* ha sido el que ha desempeñado un mejor papel ya que era el único, entre los optimizadores empleados, poco susceptible al ruido gracias al no requerir la evaluación de gradientes, haciendo que sea menos propenso a converger en un mínimo local de la función de coste. Como era de esperar, los mejores resultados han sido obtenidos con un mayor número de *shots*. No obstante, cabe considerar que cuanto mayor es el número de *shots*, más veces se ejecuta el circuito cuántico, aumentando los tiempos de ejecución. Es importante encontrar un balance entre la precisión del algoritmo y su tiempo computacional. Por último, se ha observado que el punto de partida del *ansatz* juega un papel fundamental, sobre todo en el caso del *ansatz UCCSD*, ayudando al algoritmo a explorar el espacio de soluciones de manera más eficiente, acercándose así más rápidamente al valor mínimo de la función de coste.

Por otro lado, las simulaciones realizadas con el algoritmo *VQE* añadiendo modelos de ruido de ordenadores cuánticos de *IBM* han mostrado que el rendimiento y la precisión de los resultados se ven significativamente afectados por el ruido. Entre los diferentes *backends* utilizados, el *backend* de *sherbrooke* ha proporcionado los resultados más consistentes y precisos. Estos resultados resaltan la importancia de considerar el ruido en las simulaciones cuánticas y de continuar desarrollando técnicas de mitigación de ruido para mejorar los resultados y la estabilidad de los cálculos cuánticos en entornos reales.

Capítulo 4

Potencial de Yukawa

En este capítulo, se analizan los resultados obtenidos para las simulaciones de un sistema formado por un electrón en un potencial de Yukawa [28], realizadas mediante el algoritmo *VQE*.

A diferencia de la sección anterior, en la cual se ha empleado un *driver* químico para obtener el Hamiltoniano del sistema, se han calculado directamente los coeficientes de la integral de un cuerpo (2.18) sustituyendo el potencial \hat{V}_{ne} por un potencial de Yukawa (4.1). En estos casos estudiados, solo se ha considerado un electrón, por lo tanto, todos los coeficientes de la integral de dos cuerpos (2.19) son nulos.

$$\hat{V}_{\text{Yukawa}} = -Z \frac{e^{-\alpha r}}{r} \quad (4.1)$$

Donde Z corresponde con el número atómico del núcleo y α al parámetro de apantallamiento. La física de este potencial depende fuertemente del valor de α . Mientras que en el caso de Coulomb, $\alpha = 0$, hay un número infinito de estados ligados, para cualquier valor positivo de α , el apantallamiento es suficiente para reducir este número a uno finito. [29] Por lo tanto, existe un cierto valor crítico, α_c , para el cual los estados ligados dejan de existir por completo. [30]

Para abordar el cálculo de los coeficientes de la integral de un cuerpo, h_{pq} , se ha optado por descomponer la función de onda en términos de funciones hidrogenoides, que son soluciones exactas para el potencial de Coulomb, $\alpha = 0$. Este enfoque permite expresar la función de onda del electrón bajo el potencial de Yukawa como una serie de funciones hidrogenoides. Idealmente, un número infinito de términos proporcionaría una solución exacta. Sin embargo, debido a consideraciones computacionales, se ha truncado esta serie a un número finito, N . La precisión de la aproximación aumenta con la inclusión de más términos. Este enfoque no solo facilita el cálculo de los coeficientes de la integral de un cuerpo, también mejora la representación de la función de onda del electrón en el contexto del potencial de Yukawa.

En la siguiente ecuación, se muestra el cálculo de los coeficientes de la integral de un cuerpo a partir de las funciones de onda radiales, $R_{nl}(r)$, y los armónicos esféricos, $Y_{lm}(\theta, \phi)$.

$$\begin{aligned}
h_{pq} &= \int d\mathbf{x} \lambda_p^*(\mathbf{x}) \left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + \hat{V}_{\text{Yukawa}} \right) \lambda_q(\mathbf{x}) \\
&= \int d\mathbf{x} R_{nl}^*(r) Y_{lm}^*(\theta, \phi) \left(-\frac{1}{2}\nabla^2 - Z \frac{e^{-\alpha r}}{r} \right) R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \\
&= \int_0^\infty dr r^2 R_{nl}^*(r) \left(-\frac{1}{2}\nabla^2 - Z \frac{e^{-\alpha r}}{r} \right) R_{nl}(r) \\
&= -\frac{1}{2} \int_0^\infty dr u_{nl}^*(r) \frac{\partial^2 u_{nl}(r)}{\partial r^2} - Z \int_0^\infty dr |u_{nl}(r)|^2 \frac{e^{-\alpha r}}{r}
\end{aligned} \tag{4.2}$$

Donde $u_{nl}(r) = r R_{nl}(r)$ viene dado por las funciones de onda radiales, las cuales pueden determinarse a partir de los polinomios asociados de Laguerre, $L_j^k(x)$. [31]

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2Z}{n}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} e^{-Zr/n} \left(\frac{2rZ}{n}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2rZ}{n}\right) \tag{4.3}$$

Una vez obtenidos los coeficientes de h_{pq} , se ha empleado la librería *Qiskit Nature* y la transformación de Jordan-Wigner, respectivamente, para obtener los operadores de segunda cuantización y para transformarlos en operadores de qubits. Tras obtener el hamiltoniano en términos de las matrices de Pauli, se han empleado dos métodos para obtener la energía del estado fundamental del sistema: uno clásico y un algoritmo cuántico, el algoritmo *VQE*, obtenido a partir de la librería *Qiskit Algorithms*.

En estas secciones se ha hecho un estudio dirigido a la obtención del parámetro de apantallamiento crítico, α_c , mediante algoritmos de computación cuántica. Primero se presentan los resultados obtenidos mediante métodos clásicos, después los obtenidos con el algoritmo *VQE* y, por último, los obtenidos con el algoritmo *VQE* añadiendo modelos de ruido.

4.1. Métodos clásicos

En esta sección, se llevan a cabo, mediante métodos clásicos, las medidas de la energía del estado fundamental de un electrón en el potencial de Yukawa (4.1) para un valor del número atómico, $Z = 1$. Este método se basa en obtener los autovalores de las matrices h_{pq} mediante la librería *SymPy*.¹

Se han realizado diferentes cálculos considerando varios valores de Z para la obtención de las funciones de onda radiales (4.3), con el fin de observar los resultados obtenidos con diferentes bases. Desde el punto de vista del espacio de Hilbert, las funciones hidrogenoides forman una base para cualquier valor real de Z . Al probar con varios valores de Z , se busca determinar cuál proporciona la mejor aproximación al truncar la serie a un número finito de términos N .

¹https://github.com/juan-gomez-mazorra-uc/TFG/blob/main/results/2_yukawa/yukawa_classic.

En las siguientes figuras, se muestra la energía del estado fundamental de un electrón en el potencial de Yukawa, E , en función del parámetro de apantallamiento, α , para las diferentes bases empleadas y para los diferentes tamaños de dichas bases. Como se ha explicado anteriormente, en este caso se han utilizado las funciones de onda hidrogenoides ya que, aunque no sean estados propios del potencial de Yukawa, se espera que proporcionen una buena aproximación, especialmente para valores de α próximos a 0.

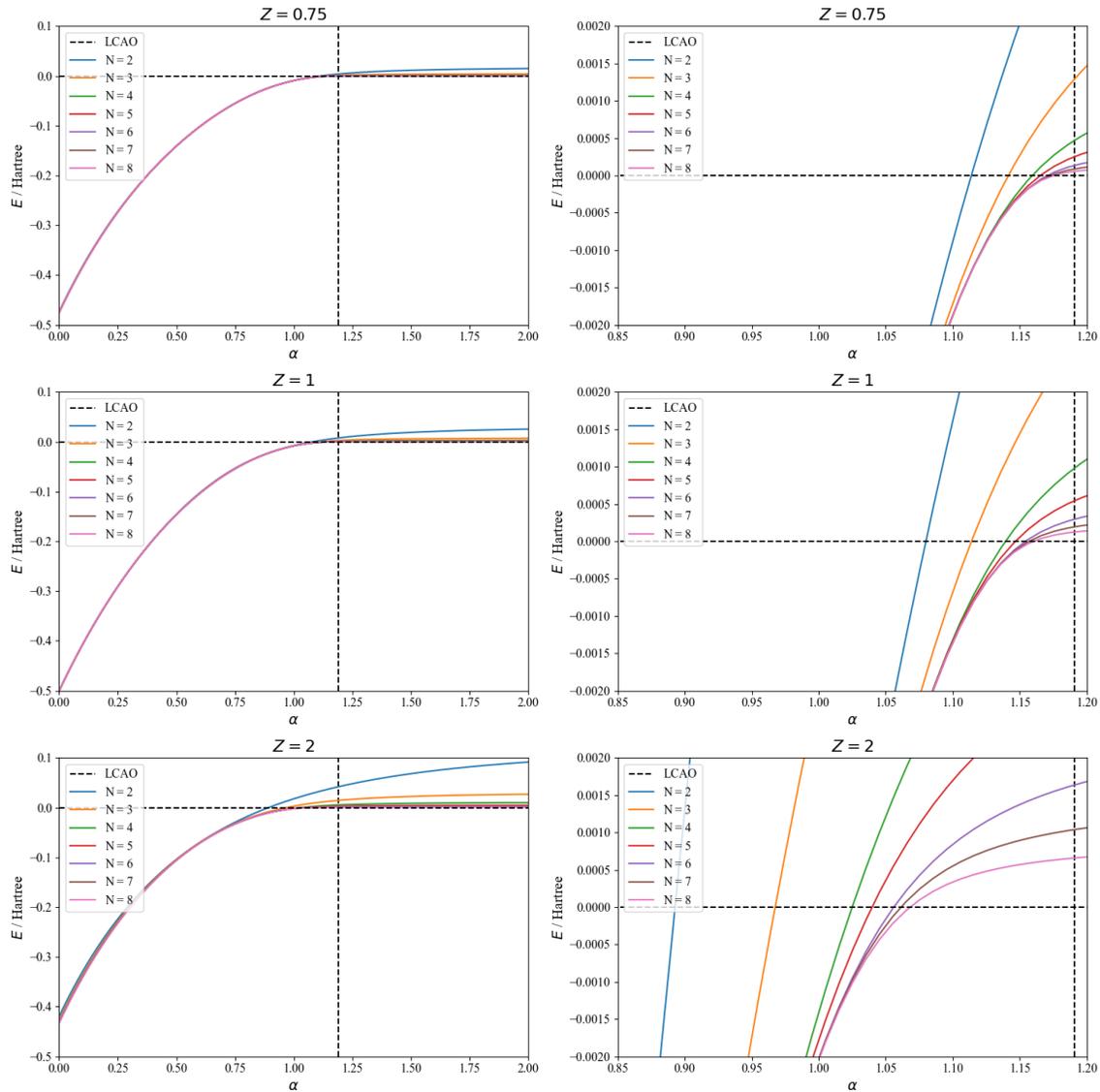


Figura 4.1: Resultados obtenidos mediante métodos clásicos de la energía del estado fundamental de un electrón en el potencial de Yukawa para diferentes tamaños de la base y diferentes valores de Z . La línea vertical representa el valor del parámetro de apantallamiento crítico, $\alpha_c = 1,19061074$, obtenido mediante el método *LCAO* (*Linear Combination of Atomic Orbitals*). [32]

Como puede observarse en la Figura 4.1, el valor del parámetro de apantallamiento crítico, α_c , para el cual la energía del estado fundamental es 0, varía en función de la base seleccionada y de su tamaño. En la siguiente tabla, se muestran los valores de α_c para cada uno de los casos estudiados.

$Z = 1$		$Z = 2$		$Z = 0,75$	
N	$\alpha_c \pm 0,005$	N	$\alpha_c \pm 0,005$	N	$\alpha_c \pm 0,005$
2	1,080	2	0,889	2	1,111
3	1,111	3	0,970	3	1,141
4	1,141	4	1,020	4	1,161
5	1,151	5	1,040	5	1,161
6	1,151	6	1,060	6	1,171
7	1,161	7	1,060	7	1,171
8	1,161	8	1,070	8	1,171

Tabla 4.1: Valores del parámetro de apantallamiento crítico, α_c , obtenidos para las diferentes bases empleadas.

El valor del parámetro de apantallamiento crítico obtenido mediante el método *LCAO* (*Linear Combination of Atomic Orbitals*) [32] es de $\alpha_c = 1,19061074$. Como puede observarse en la Figura 4.1 y en la Tabla 4.1, los valores obtenidos se acercan al valor dado en la literatura a medida que el tamaño de la base aumenta. Además, los valores más próximos al valor dado en la literatura son los cálculos realizados con la base obtenida con $Z = 0,75$. A partir de los valores de la Tabla 4.1, en la Figura 4.2 se muestra el valor del parámetro de apantallamiento crítico, α_c , en función del tamaño de la base, N , para las diferentes bases estudiadas.

Además de la consideración anterior, la elección del valor de $Z = 0,75$ para la generación de la base utilizada en las simulaciones realizadas con el algoritmo *VQE*, se basa en un cálculo semianalítico, cuyos procedimientos exactos no se detallan, presentándose simplemente como un resultado de un análisis variacional. Aunque los valores de α_c para diferentes tamaños de base, como se detalla en la Tabla 4.1, no coinciden con el valor obtenido a través del método *LCAO* [32], el propósito fundamental de este estudio reside en verificar si es posible alcanzar resultados similares con un ordenador cuántico y uno clásico.

La elección de $Z = 0,75$ para la base empleada se justifica por la naturaleza menos atractiva del potencial de Yukawa en comparación con la del potencial coulombiano. Por lo tanto, una carga efectiva menor proporciona una aproximación más precisa. En la Figura 4.1 y en la Tabla 4.1, puede observarse como los valores más alejados del valor en la literatura son los proporcionados por la base obtenida con $Z = 2$, corroborando que la naturaleza del potencial de Yukawa debe ser inferior a la del potencial coulombiano.

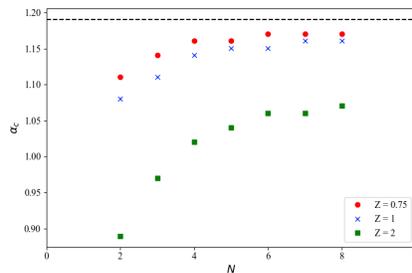


Figura 4.2: Valores del parámetro de apantallamiento para diferentes bases y tamaños de las bases. Las barras de error no son apreciables a esta escala. La línea negra denota el valor $\alpha_c = 1,19061074$, obtenido mediante el método *LCAO*. [32]

En la Figura 4.2, puede observarse que los valores de α_c más próximos al valor dado en la literatura [32] corresponden con la base obtenida con $Z = 0,75$. Además, como se ha comentado anteriormente, en todos los casos los valores de α_c se acercan al valor dado en la literatura a medida que el tamaño de la base aumenta.

4.2. Simulaciones de algoritmos cuánticos sin ruido

En esta sección, se realizan simulaciones de algoritmos cuánticos sin ruido de un electrón en el potencial de Yukawa para un valor del número atómico, $Z = 1$, variando distintos parámetros del algoritmo *VQE*. Se ha variado el número de *shots* y el optimizador empleado para las simulaciones.²

El *ansatz UCCSD* ha proporcionado unos mejores resultados para las simulaciones de sistemas moleculares realizadas en el capítulo 3, por lo tanto, las simulaciones realizadas en esta sección han empleado el mismo *ansatz* con un estado inicial de Hartree-Fock. Los valores del número de *shots* empleados para realizar las simulaciones han sido 16, 128, 1024 y 16384. No se han realizado simulaciones con un número de *shots* superior ya que los tiempos de ejecución son proporcionales al número de interacciones que realiza el algoritmo.

Estas simulaciones han sido realizadas con tres optimizadores diferentes: *COBYLA*, *SLSQP* y *SPSA*, obtenidos a partir de la librería *Qiskit Algorithms*. Además, como se ha explicado anteriormente, las simulaciones se han realizado con una base obtenida con $Z = 0,75$ para diferentes tamaños de dicha base, N .

En Figuras B.1 - B.4, se muestra la energía del estado fundamental de un electrón en el potencial de Yukawa, E , en función del parámetro de apantallamiento, α , para los diferentes casos estudiados con los distintos optimizadores. Por otro lado, en la siguiente figura, se muestran los resultados obtenidos con el optimizador *COBYLA*, el cual proporciona unos mejores resultados.

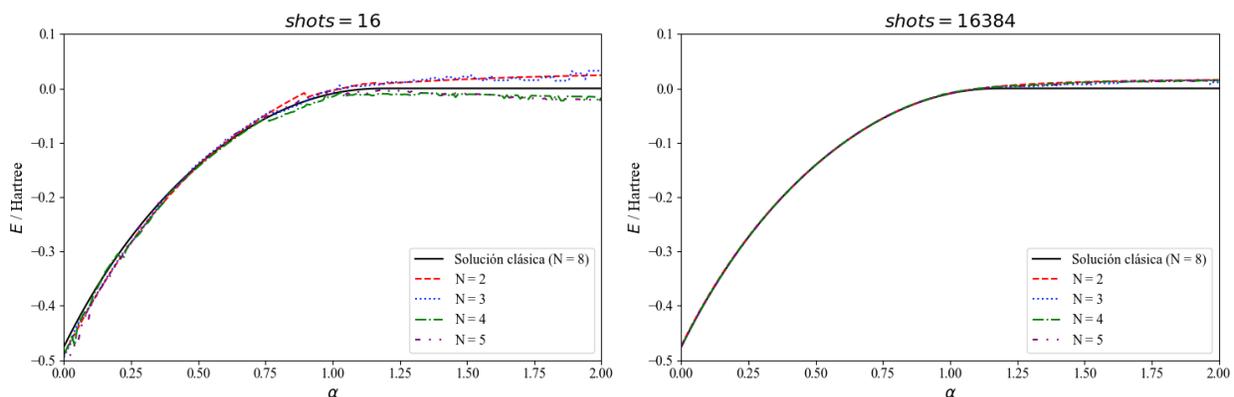


Figura 4.3: Simulación de la energía del estado fundamental de un electrón en el potencial de Yukawa con diferentes valores del número de *shots* y tamaños de la base, empleando el optimizador *COBYLA*. En la Figura B.5, se muestran estas simulaciones con distintos valores del número de *shots*.

²https://github.com/juan-gomez-mazorra-uc/TFG/blob/main/results/2_yukawa/yukawa_aer.

A diferencia de los resultados de la sección anterior, obtenidos mediante métodos clásicos, en esta sección solo se han realizado estas simulaciones para bases con un tamaño hasta $N = 5$ debido a que los tiempos de ejecución aumentan considerablemente con el tamaño de las bases. Cabe recordar que estas simulaciones se han realizado con un ordenador clásico, por lo tanto, los tiempos de ejecución aumentan exponencialmente con el tamaño del sistema estudiado. Si se hubiesen realizado estas medidas en un dispositivo cuántico, se requeriría un número de qubits que crece linealmente con el tamaño del sistema. En el contexto de la teoría de la estructura electrónica, el atractivo de la computación cuántica es ofrecer la posibilidad de modelar y manipular sistemas más complejos, más allá de lo que es posible con la computación convencional. [16]

En las Figuras B.1 - B.4, los resultados de las simulaciones realizadas con el optimizador *COBYLA* son más precisas que las realizadas con los otros optimizadores, para cualquier número de *shots*, al igual que en las simulaciones realizadas para el sistema de la molécula de hidrógeno. En la siguiente tabla, se muestran los valores de α_c en cada una de las simulaciones realizadas.

$N = 2$				$N = 3$			
<i>optimizer</i>	<i>shots</i>	α_c	$\Delta\alpha_c$	<i>optimizer</i>	<i>shots</i>	α_c	$\Delta\alpha_c$
<i>COBYLA</i>	16	$1,030 \pm 0,005$	13,49 %	<i>COBYLA</i>	16	$1,020 \pm 0,005$	14,33 %
<i>COBYLA</i>	128	$1,131 \pm 0,005$	5,01 %	<i>COBYLA</i>	128	$1,21 \pm 0,09$	1,63 %
<i>COBYLA</i>	1024	$1,111 \pm 0,005$	6,69 %	<i>COBYLA</i>	1024	$1,111 \pm 0,005$	6,69 %
<i>COBYLA</i>	16384	$1,111 \pm 0,005$	6,69 %	<i>COBYLA</i>	16384	$1,121 \pm 0,005$	5,85 %
<i>SLSQP</i>	16	$0,7 \pm 0,3$	41,21 %	<i>SLSQP</i>	16	$0,6 \pm 0,3$	49,61 %
<i>SLSQP</i>	128	$0,7 \pm 0,4$	41,21 %	<i>SLSQP</i>	128	$0,6 \pm 0,4$	49,61 %
<i>SLSQP</i>	1024	$0,7 \pm 0,4$	41,21 %	<i>SLSQP</i>	1024	$0,6 \pm 0,4$	49,61 %
<i>SLSQP</i>	16384	$0,6 \pm 0,4$	49,61 %	<i>SLSQP</i>	16384	$0,7 \pm 0,3$	41,21 %
<i>SPSA</i>	16	$0,8 \pm 0,2$	32,81 %	<i>SPSA</i>	16	$0,7 \pm 0,3$	41,21 %
<i>SPSA</i>	128	$0,8 \pm 0,3$	32,81 %	<i>SPSA</i>	128	$0,8 \pm 0,3$	32,81 %
<i>SPSA</i>	1024	$0,8 \pm 0,3$	32,81 %	<i>SPSA</i>	1024	$0,8 \pm 0,3$	32,81 %
<i>SPSA</i>	16384	$0,8 \pm 0,3$	32,81 %	<i>SPSA</i>	16384	$0,8 \pm 0,3$	32,81 %

$N = 4$				$N = 5$			
<i>optimizer</i>	<i>shots</i>	α_c	$\Delta\alpha_c$	<i>optimizer</i>	<i>shots</i>	α_c	$\Delta\alpha_c$
<i>COBYLA</i>	16			<i>COBYLA</i>	16	$0,985 \pm 0,005$	17,27 %
<i>COBYLA</i>	128	$1,25 \pm 0,05$	4,99 %	<i>COBYLA</i>	128	$1,6 \pm 0,4$	34,38 %
<i>COBYLA</i>	1024	$1,151 \pm 0,005$	3,33 %	<i>COBYLA</i>	1024	$1,121 \pm 0,005$	5,85 %
<i>COBYLA</i>	16384	$1,111 \pm 0,005$	6,69 %	<i>COBYLA</i>	16384	$1,121 \pm 0,005$	5,85 %
<i>SLSQP</i>	16	$0,7 \pm 0,4$	41,21 %	<i>SLSQP</i>	16	$1,0 \pm 0,7$	16,01 %
<i>SLSQP</i>	128	$0,7 \pm 0,4$	41,21 %	<i>SLSQP</i>	128	$1,0 \pm 0,8$	16,01 %
<i>SLSQP</i>	1024	$0,6 \pm 0,4$	49,61 %	<i>SLSQP</i>	1024	$0,7 \pm 0,4$	41,21 %
<i>SLSQP</i>	16384	$0,7 \pm 0,4$	41,21 %	<i>SLSQP</i>	16384	$0,6 \pm 0,4$	49,61 %
<i>SPSA</i>	16	$1,3 \pm 0,3$	9,19 %	<i>SPSA</i>	16	$1,1 \pm 0,8$	7,61 %
<i>SPSA</i>	128	$1,4 \pm 0,5$	17,59 %	<i>SPSA</i>	128	$1,1 \pm 0,8$	7,61 %
<i>SPSA</i>	1024	$0,8 \pm 0,3$	32,81 %	<i>SPSA</i>	1024	$1,1 \pm 0,8$	7,61 %
<i>SPSA</i>	16384	$0,8 \pm 0,3$	32,81 %	<i>SPSA</i>	16384	$0,8 \pm 0,3$	32,81 %

Tabla 4.2: Valores del parámetro de apantallamiento crítico, α_c , obtenidos para las diferentes simulaciones realizadas. $\Delta\alpha_c$ representa el error relativo de los valores de α_c obtenidos en las simulaciones en comparación con el valor $\alpha_c = 1,19061074$, dado en la literatura [32].

Los valores de α_c de la Tabla 4.2 se han determinado identificando los valores de α en los cuales la energía cambia de signo. El valor de α_c se obtiene calculando la media de estos valores de α , y su error está definido de manera que abarque todos esos valores. Por este método de determinar el valor de α_c , los casos que no haya un cambio de signo en la energía no tendrán un valor de α_c asociado.

En la Tabla 4.2, puede observarse como las simulaciones que han proporcionado un valor más preciso de α_c , y con un menor error, han sido las realizadas con el optimizador *COBYLA*, un número de *shots* alto y un tamaño de base grande. El valor más próximo al valor proporcionado en la literatura ha sido el obtenido con el optimizador *COBYLA*, un número de *shots* = 128 y un tamaño de base $N = 3$, pero esta medida presenta un gran error debido al ruido ocasionado por el número de *shots* tan bajo.

Se ha determinado que el optimizador *COBYLA* ofrece los resultados más precisos en general. Sin embargo, se observa que ciertos valores de α_c muestran una mayor precisión cuando se utilizan valores de *shots* y tamaños de bases más pequeños. Por este motivo, se ha llevado a cabo un estudio detallado, realizando un barrido desde $\alpha = 1$ hasta $\alpha = 1,2$, con el fin de mejorar la precisión de las medidas. En la Tabla 4.3 y en la Figura 4.4, se muestran los resultados obtenidos.³

$N = 2$			$N = 3$		
<i>shots</i>	α_c	$\Delta\alpha_c$	<i>shots</i>	α_c	$\Delta\alpha_c$
16	$1,0327 \pm 0,0005$	13,26 %	16	$1,030 \pm 0,014$	13,49 %
128	$1,1322 \pm 0,0005$	4,91 %	128	$1,15 \pm 0,05$	3,41 %
1024	$1,1060 \pm 0,0005$	7,11 %	1024	$1,1131 \pm 0,0005$	6,51 %
16384	$1,1090 \pm 0,0005$	6,85 %	16384	$1,1231 \pm 0,0005$	5,67 %

$N = 4$			$N = 5$		
<i>shots</i>	α_c	$\Delta\alpha_c$	<i>shots</i>	α_c	$\Delta\alpha_c$
16			16	$1,036 \pm 0,006$	12,99 %
128			128		
1024	$1,141 \pm 0,007$	4,17 %	1024	$1,13 \pm 0,01$	5,09 %
16384	$1,112 \pm 0,003$	6,6 %	16384	$1,121 \pm 0,002$	5,85 %

Tabla 4.3: Valores del parámetro de apantallamiento crítico, α_c , obtenidos para las simulaciones realizadas con el optimizador *COBYLA*. $\Delta\alpha_c$ representa el error relativo de los valores de α_c obtenidos en las simulaciones en comparación con el valor $\alpha_c = 1,19061074$, dado en la literatura [32].

Puede observarse en la Tabla 4.3 como, para los casos con una base del mismo tamaño, los valores de α_c mejoran, en su gran mayoría, cuando el número de *shots* aumenta. Sin embargo, hay situaciones particulares en las que se obtienen mejores resultados con un menor número de *shots*. Esto puede deberse a varios factores, como la convergencia del optimizador empleado o la naturaleza probabilística de las mediciones en algoritmos cuánticos. Si se repitiesen las mismas simulaciones con un parámetro de semilla diferente para el *estimator*, se obtendrían resultados distintos.

³https://github.com/juan-gomez-mazorra-uc/TFG/blob/main/results/2_yukawa/yukawa_aer_precision.

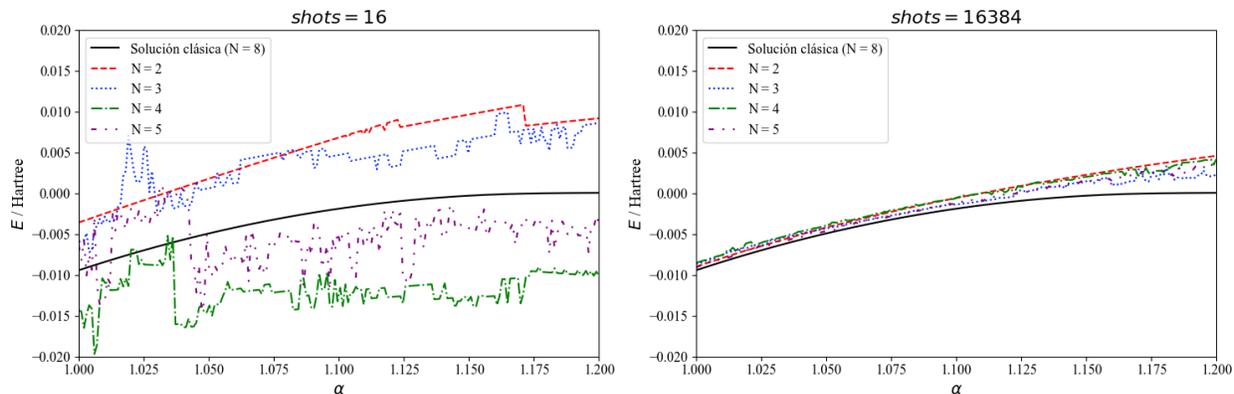


Figura 4.4: Simulación de la energía del estado fundamental de un electrón en el potencial de Yukawa con diferentes valores del número de *shots* y tamaños de la base, empleando el optimizador *COBYLA*. En la Figura B.6, se muestran estas simulaciones con distintos valores del número de *shots*.

Para los casos con el mismo número de *shots*, los valores de α_c mejoran al aumentar el tamaño de la base, como era de esperar. Al igual que se ha mostrado en la sección anterior y en la Tabla 4.1, los valores de α_c se aproximan al valor de la literatura al incrementar el tamaño de la base. Sin embargo, hay ciertos resultados que no mejoran al aumentar el tamaño de la base, lo cual podría deberse a que los sistemas definidos con bases mayores son más complejos y, por lo tanto, más susceptibles al ruido.

Para comprender mejor estos resultados, es crucial considerar que cada ejecución de un algoritmo cuántico implica mediciones sujetas a ruido. Aumentar el número de *shots*, generalmente ayuda a reducir el ruido, pero los resultados pueden variar entre ejecuciones debido a que los algoritmos variacionales como el *VQE* dependen de un proceso de optimización que puede converger a diferentes soluciones, especialmente si la función de coste tiene múltiples mínimos locales. En la Figura 4.5, puede apreciarse la variabilidad de los resultados entre ejecuciones y el incremento del ruido de las simulaciones a medida que el tamaño de la base aumenta.⁴

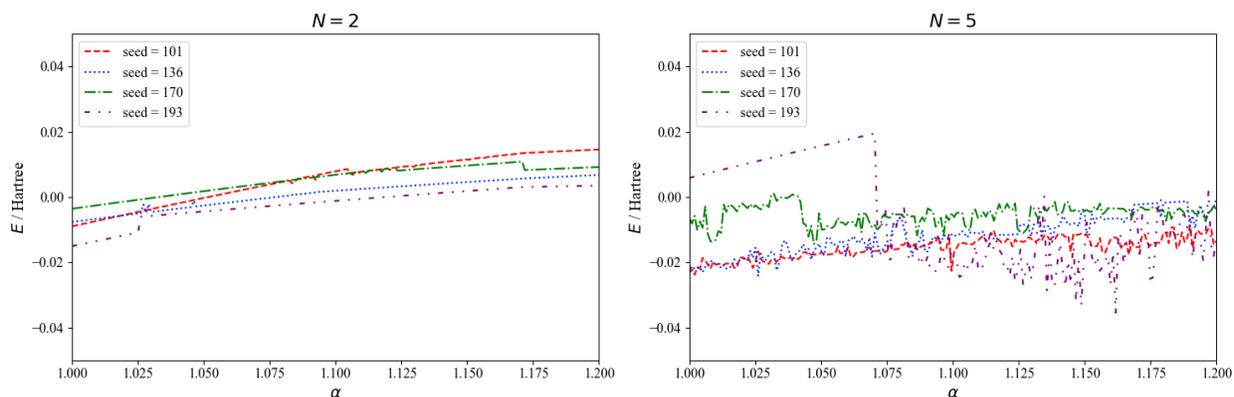


Figura 4.5: Simulación de la energía del estado fundamental de un electrón en el potencial de Yukawa con diferentes valores de la semilla y tamaños de la base, empleando el optimizador *COBYLA* y 16 *shots*. En la Figura B.7 se muestran estas simulaciones con distintos tamaños de la base.

⁴https://github.com/juan-gomez-mazorra-uc/TFG/blob/main/results/2_yukawa/yukawa_aer_seed.

4.3. Simulaciones de algoritmos cuánticos con ruido

En esta sección, se realizan simulaciones de algoritmos cuánticos con ruido de un electrón en el potencial de Yukawa para un valor del número atómico, $Z = 1$.⁵

En la siguiente figura se muestra la energía del estado fundamental de un electrón en el potencial de Yukawa, E , en función del parámetro de apantallamiento, α , aplicando diferentes modelos de ruido. Estas simulaciones han sido realizadas con los parámetros que han proporcionado los mejores resultados en la sección 4.2: el optimizador *COBYLA* y un tamaño de base $N = 2$.

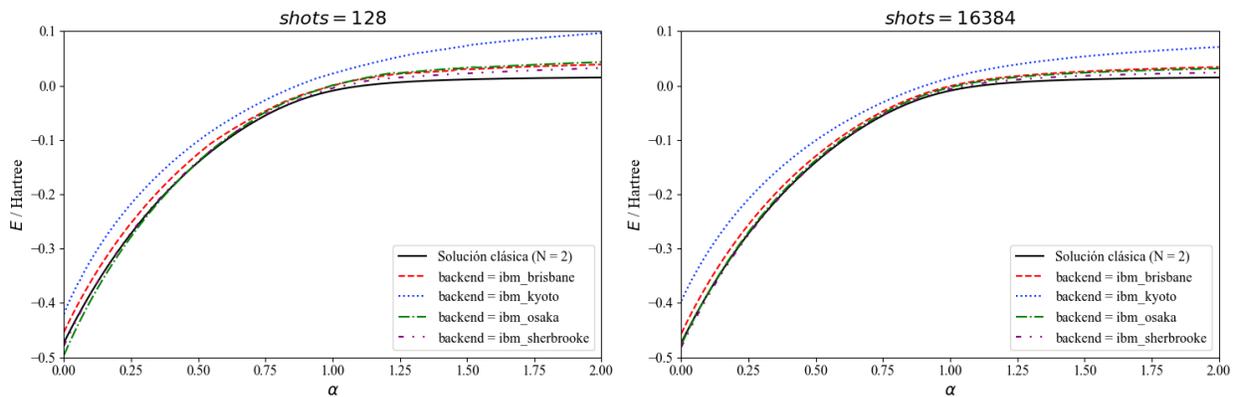


Figura 4.6: Simulación de la energía del estado fundamental de un electrón en el potencial de Yukawa con diferentes modelos de ruido y valores del número de *shots*, empleando el optimizador *COBYLA* y un tamaño de base $N = 2$.

A diferencia de las simulaciones realizadas sin modelos de ruido, solo se han realizado estas simulaciones para bases con un tamaño de $N = 2$ debido a que los tiempos de ejecución aumentan de manera considerable al añadir los modelos de ruido. Sin embargo, con el caso estudiado, comparando con el resultado obtenido a partir de métodos clásicos, pueden determinarse los efectos de los modelos de ruido a la hora de obtener el parámetro de apantallamiento crítico.

A partir de los datos representados en la Figura 4.6, puede obtenerse el valor del parámetro de apantallamiento crítico, α_c , para los diferentes casos simulados. Los valores de α_c , para el caso con un mayor número de *shots*, vienen dados en la Tabla 4.4.

<i>backend</i>	α_c $\pm 0,005$	$\Delta\alpha_c$
<i>ibm_brisbane</i>	1,010	9,09 %
<i>ibm_kyoto</i>	0,910	18,09 %
<i>ibm_osaka</i>	1,030	7,29 %
<i>ibm_sherbrooke</i>	1,060	4,59 %

Tabla 4.4: Valores del parámetro de apantallamiento crítico, α_c , obtenidos para el caso de 16384 *shots*. $\Delta\alpha_c$ representa el error relativo de los valores de α_c obtenidos en las simulaciones en comparación con el valor $\alpha_c = 1,111$, obtenido mediante métodos clásicos para el mismo tamaño de la base, dado en la Tabla 4.1.

⁵https://github.com/juan-gomez-mazorra-uc/TFG/blob/main/results/2_yukawa/yukawa_noise_model.

A diferencia de los resultados obtenidos en las simulaciones de la molécula de hidrógeno con ruido, los resultados obtenidos en estas simulaciones son significativamente más precisos, con un error relativo de un 4,59 % en el mejor de los casos, en comparación con el 30,71 % obtenido en la sección 3.2. Al igual que en dicha sección, el *backend* que mejores resultados ha proporcionado ha sido el de *sherbrook*.

4.4. Ejecuciones en ordenadores cuánticos

Además de los estudios anteriores, se ha intentado realizar una comparación del aumento de los tiempos de ejecución entre un ordenador clásico y uno cuántico a medida que la complejidad del sistema incrementa. Para ello, se han realizado distintas simulaciones en un ordenador clásico y ejecuciones en un ordenador cuántico del sistema del potencial de Yukawa, variando el tamaño de las bases. Para realizar las ejecuciones en el ordenador cuántico, se ha empleado la plataforma *IBM Quantum Platform*. Sin embargo, el estudio no se ha podido completar debido a que actualmente esta plataforma solo permite realizar ejecuciones durante 10 minutos al mes. Considerando que algunos ejemplos más sencillos que el sistema estudiado, presentados por *IBM* [33], tienen un tiempo de ejecución estimado de 28 minutos, se ha tenido que desestimar la idea. Además, la conexión con la plataforma en algunas ejecuciones ha resultado ser bastante inestable, lo que ha imposibilitado realizar medidas durante largos tiempos de ejecución.⁶

4.5. Resumen

En las medidas realizadas mediante métodos clásicos del potencial de Yukawa, se ha observado como los valores de α_c varían en función de la base empleada y del tamaño de la misma. Las bases que han proporcionado unos mejores resultados, en comparación con los valores de la literatura, han sido las obtenidas con un parámetro $Z = 0,75$. Estos valores mejoran a medida que el tamaño de la base aumenta.

Por otro lado, las simulaciones realizadas con el algoritmo *VQE* han mostrado que los valores de α_c también dependen del *ansatz*, el optimizador, el número de *shots* y de la aleatoriedad de las simulaciones. Estas simulaciones han indicado que el optimizador *COBYLA* y un número suficiente de *shots*, proporcionan los resultados más precisos y estables. Sin embargo, el rendimiento de las simulaciones cuánticas puede variar significativamente debido al ruido y las fluctuaciones estadísticas inherentes a los sistemas cuánticos actuales, resaltando la importancia de realizar múltiples simulaciones para obtener una distribución precisa de resultados.

Por último, las simulaciones realizadas con el algoritmo *VQE* añadiendo modelos de ruido de ordenadores cuánticos de *IBM* han mostrado una mayor precisión que las simulaciones de la molécula de hidrógeno. Al igual que en dichas simulaciones, el *backend* que ha proporcionado unos mejores resultados ha sido el de *sherbrook*.

⁶https://github.com/juan-gomez-mazorra-uc/TFG/blob/main/results/5_ibm/ibm_vqe.ipynb.

Capítulo 5

Pozo de potencial infinito

En este capítulo, se analizan los resultados obtenidos para las simulaciones de un sistema formado por dos electrones en un pozo de potencial infinito en una región unidimensional, realizadas mediante el algoritmo *VQE*.

Al igual que en el capítulo anterior, se han calculado directamente los coeficientes de la integral de un cuerpo (2.18) sustituyendo el potencial \hat{V}_{ne} por un pozo de potencial infinito (5.1) de longitud L . Además, en este caso, al tratarse de un sistema con más de una partícula, también se han calculado directamente los coeficientes de la integral de dos cuerpos (2.19) sustituyendo el potencial \hat{V}_{ee} por un potencial de contacto (5.2).

$$\hat{V}_{\text{pozo}} = \begin{cases} \infty & , \quad x \leq 0 \\ 0 & , \quad 0 < x < L \\ \infty & , \quad x \geq L \end{cases} \quad (5.1)$$

$$\hat{V}_{\text{contacto}} = V_0 \cdot \delta(x_k - x_l) \quad (5.2)$$

Donde V_0 es una constante que determina la intensidad de la interacción, x_k es la posición de la partícula k y x_l la de la partícula l .

Para el cálculo de los coeficientes de la integral de un cuerpo, h_{pq} , y de dos cuerpos, g_{pqrs} , se han empleado las funciones de onda propias, $\lambda_n(x)$, de una partícula en un pozo de potencial infinito de longitud L .

$$\lambda_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.3)$$

Con su correspondiente energía

$$E_n = \frac{1}{2} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (5.4)$$

A partir de las ecuaciones de las funciones de onda propias (5.3), pueden obtenerse los coeficientes de h_{pq} (2.18) y g_{hpql} (2.19) de la siguiente manera.

$$\begin{aligned}
h_{pq} &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \lambda_p^*(x) \left(-\frac{1}{2} \nabla^2 + \hat{V}_{\text{pozo}} \right) \lambda_q(x) \\
&= \int_0^L dx \lambda_p^*(x) \left(-\frac{1}{2} \nabla^2 \right) \lambda_q(x) \\
&= -\frac{1}{2} \int_0^L dx \lambda_p^*(x) \frac{\partial^2 \lambda_q(x)}{\partial x^2} \\
&= \frac{1}{L} \left(\frac{q\pi}{L} \right)^2 \int_0^L dx \sin \left(\frac{p\pi x}{L} \right) \sin \left(\frac{q\pi x}{L} \right)
\end{aligned} \tag{5.5}$$

$$\begin{aligned}
g_{pqrs} &= \iint dx_1 dx_2 \lambda_p^*(x_1) \lambda_q^*(x_2) \lambda_r(x_2) \lambda_s(x_1) \cdot \hat{V}_{\text{contacto}} \\
&= \iint dx_1 dx_2 \lambda_p^*(x_1) \lambda_q^*(x_2) \lambda_r(x_2) \lambda_s(x_1) \cdot V_0 \cdot \delta(x_1 - x_2) \\
&= V_0 \int_0^L dx_1 \lambda_p^*(x_1) \lambda_q^*(x_1) \lambda_r(x_1) \lambda_s(x_1) \\
&= V_0 \left(\frac{2}{L} \right)^2 \int_0^L dx_1 \sin \left(\frac{p\pi x_1}{L} \right) \sin \left(\frac{q\pi x_1}{L} \right) \sin \left(\frac{r\pi x_1}{L} \right) \sin \left(\frac{s\pi x_1}{L} \right)
\end{aligned} \tag{5.6}$$

En una primera aproximación, se intentó realizar este estudio utilizando un potencial de repulsión entre electrones como el del Hamiltoniano electrónico (5.7).

$$\hat{V} = \frac{1}{|x_1 - x_2|} \tag{5.7}$$

Sin embargo, la divergencia de las integrales, necesarias para el cálculo de los coeficientes g_{hpql} , impidió continuar con el estudio de dicho potencial.

Una vez obtenidos los coeficientes de h_{pq} y g_{pqrs} , se ha empleado la librería *Qiskit Nature* y la transformación de Jordan-Wigner para obtener los operadores fermiónicos y transformarlos en operadores de qubits, respectivamente.

Tras obtener el hamiltoniano en términos de las matrices de Pauli, se han empleado dos métodos para obtener la energía del estado fundamental del sistema: uno clásico y un cuántico, el algoritmo *VQE*, obtenido a partir de la librería *Qiskit Algorithms*.

En estas secciones, se han estudiado los resultados proporcionados por el algoritmo *VQE* para un sistema de varias partículas con interacción entre ellas, empleando diferentes optimizadores, número de *shots* y tamaños de la base que describe el sistema. Para comenzar, se presentan los resultados obtenidos mediante métodos clásicos, seguidos de los obtenidos con el algoritmo y, finalmente, aquellos obtenidos con el algoritmo añadiendo modelos de ruido.

5.1. Métodos clásicos

En esta sección, se han llevado a cabo, mediante métodos clásicos, los cálculos de la energía del estado fundamental del sistema conformado por dos electrones en un pozo de potencial infinito de longitud $L = 1$, con un potencial de contacto de interacción para diferentes tamaños de la base, N .¹

Para obtener los autovalores del Hamiltoniano del sistema se ha empleado la función de onda de la partícula individual (5.3) para construir una base de funciones $\phi_{ij}(x_1, x_2)$ para el sistema de dos partículas en una dimensión.

$$\phi_{ij}(x_1, x_2) = \lambda_i(x_1) \cdot \lambda_j(x_2) \quad (5.8)$$

Estas funciones representan posibles configuraciones del sistema con dos partículas y se combinan formando funciones de onda simétricas y antisimétricas. El proceso detallado para obtener los autovalores del Hamiltoniano se explica en la sección C.1.

En las siguientes figuras, se muestra la energía del estado fundamental del sistema formado por los dos electrones, E , en función de la constante, V_0 , para los diferentes tamaños de la base empleada.

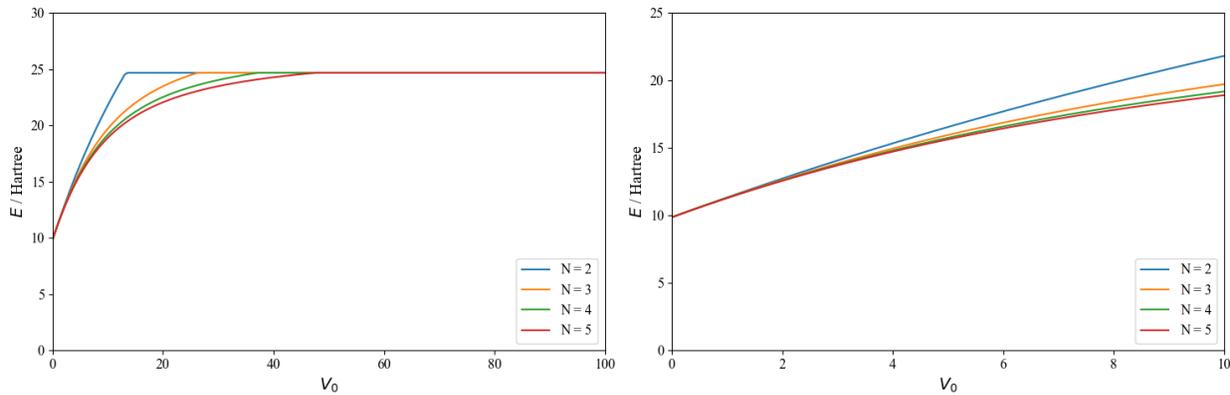


Figura 5.1: Resultados obtenidos mediante métodos clásicos de la energía del estado fundamental de dos electrones en un pozo de potencial infinito de longitud $L = 1$, con un potencial de contacto de interacción para diferentes tamaños de la base, N .

Como puede observarse en la Figura 5.1, la energía del sistema satura en un valor de $\frac{5}{2}\pi^2$ Hartree, independientemente del tamaño de la base empleada. Sin embargo, puede observarse como para valores pequeños de V_0 , es decir, cuando la interacción entre los electrones no es tan intensa, los valores de la energía del sistema son similares entre las distintas dimensiones de la base.

¹https://github.com/juan-gomez-mazorra-uc/TFG/tree/main/results/3_potential_well/potential_well_classic.

El motivo por el cual la energía del sistema satura es debido a que para los estados antisimétricos como el dado en la Ecuación (5.9).

$$\phi_{12}^-(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\lambda_1(x_1)\lambda_2(x_2) - \lambda_2(x_1)\lambda_1(x_2)] \quad (5.9)$$

La contribución a la energía del potencial de interacción (5.2) se anula.

$$\begin{aligned} E &= \langle \phi_{12}^- | V | \phi_{12}^- \rangle \\ &= \iint dx_1 dx_2 \phi_{12}^{-*}(x_1, x_2) \cdot V_0 \cdot \delta(x_1 - x_2) \cdot \phi_{12}^-(x_1, x_2) \\ &= V_0 \int dx_1 \phi_{12}^{-*}(x_1, x_1) \cdot \phi_{12}^-(x_1, x_1) \\ &= \frac{V_0}{2} \int dx_1 [\lambda_1^*(x_1)\lambda_2^*(x_1) - \lambda_2^*(x_1)\lambda_1^*(x_1)] [\lambda_1(x_1)\lambda_2(x_1) - \lambda_2(x_1)\lambda_1(x_1)] = 0 \end{aligned} \quad (5.10)$$

En consecuencia, para las soluciones antisimétricas, la energía viene dada por la suma de cada uno de los niveles de energía (5.4). En la siguiente figura, se muestran los autovalores de cada uno de los estados posibles para una base de tamaño $N = 2$.

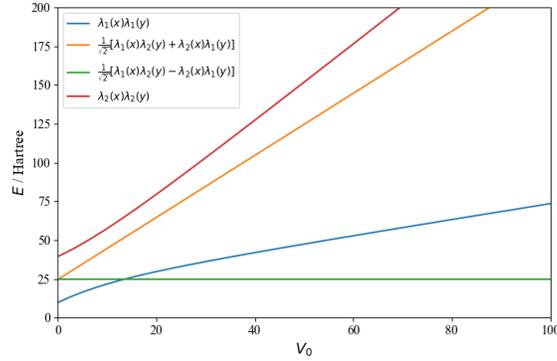


Figura 5.2: Energía de los diferentes estados del sistema conformado por dos electrones en un pozo de potencial infinito de longitud $L = 1$, con un potencial de contacto de interacción para un tamaño de base $N = 2$.

Por este motivo la energía del estado fundamental satura en un valor de $\frac{5}{2}\pi^2$ Hartree para valores altos de V_0 , independientemente del tamaño de base empleado. Cabe destacar que los valores de V_0 , para los cuales la energía del estado fundamental satura, son del orden de la energía de los niveles de dos electrones en el primer y segundo estado de energía, por lo tanto, la interacción entre los electrones para esos valores de V_0 es demasiado intensa. Por este motivo, los estudios realizados para las simulaciones con algoritmos cuánticos se han realizado con valores pequeños de V_0 .

5.2. Simulaciones de algoritmos cuánticos sin ruido

En esta sección, se realizan simulaciones de algoritmos cuánticos sin ruido de dos electrones en un pozo de potencial infinito con un potencial de contacto de interacción para un pozo de anchura, $L = 1$, variando distintos parámetros del algoritmo *VQE*. Se ha variado el número de *shots* y el optimizador empleado para las simulaciones.²

Al igual que en las secciones anteriores, el *ansatz* seleccionado para realizar las simulaciones ha sido el *UCCSD* con un estado inicial de Hartree-Fock. Por otro lado, los valores del número de *shots* empleados para realizar las simulaciones han sido 16, 128, 1024 y 16384. No se han realizado simulaciones con un número de *shots* superior ya que los tiempos de ejecución son proporcionales al número de interacciones que realiza el algoritmo.

Como en las secciones anteriores, las simulaciones han sido realizadas con tres optimizadores diferentes: *COBYLA*, *SLSQP* y *SPSA*, obtenidos a partir de la librería *Qiskit Algorithms*. Además, las simulaciones se han realizado para diferentes tamaños de la base, N .

En la Figura C.1, se muestra la energía del estado fundamental del sistema, E , en función de la constante que determina la intensidad del potencial de interacción entre los electrones, V_0 , para los diferentes casos estudiados con los distintos optimizadores. En la siguiente figura, se muestran los resultados obtenidos con el optimizador *COBYLA*, el cual proporciona unos mejores resultados.

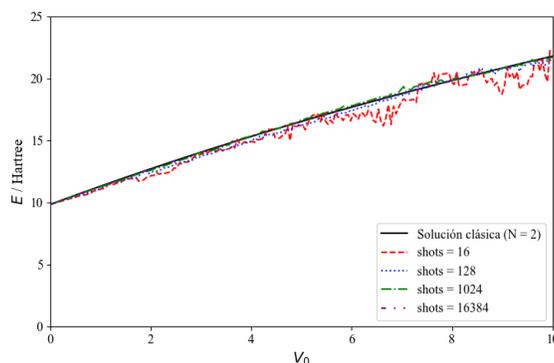


Figura 5.3: Simulación de la energía del estado fundamental de dos electrones en un pozo de potencial infinito con un potencial de contacto de interacción con diferentes valores del número de *shots*, empleando una base con un tamaño $N = 2$ y el optimizador *COBYLA*.

En esta sección, en contraste con los métodos clásicos empleados previamente, las simulaciones se han limitado a bases con un tamaño $N = 2$. Esta restricción se debe principalmente a dos factores: el aumento significativo en los tiempos de ejecución conforme crece el tamaño del sistema y la carga computacional que conlleva determinar los coeficientes de h_{pq} y g_{pqrs} . Cabe recordar que estas simulaciones se han realizado con un ordenador clásico, por lo tanto, los tiempos de ejecución aumentan exponencialmente con el tamaño del sistema estudiado.

²https://github.com/juan-gomez-mazorra-uc/TFG/tree/main/results/3_potential_well/potential_well_aer.

El incremento en los tiempos de ejecución implica que realizar simulaciones cuánticas para bases más grandes sería computacionalmente prohibitivo en términos de tiempo y recursos. Además, la obtención de los coeficientes h_{pq} y g_{pqrs} también conlleva una carga computacional significativa.

Como puede observarse en la Figura 5.3, los valores de la energía obtenidos mediante las simulaciones de algoritmos cuánticos para valores pequeños de V_0 coinciden con los valores dados por los métodos clásicos. Al igual que en las secciones anteriores, los resultados mejoran con el número de *shots*.

En la siguiente figura, pueden observarse las simulaciones realizadas para interacciones más intensas entre los electrones, con valores de V_0 más grandes.

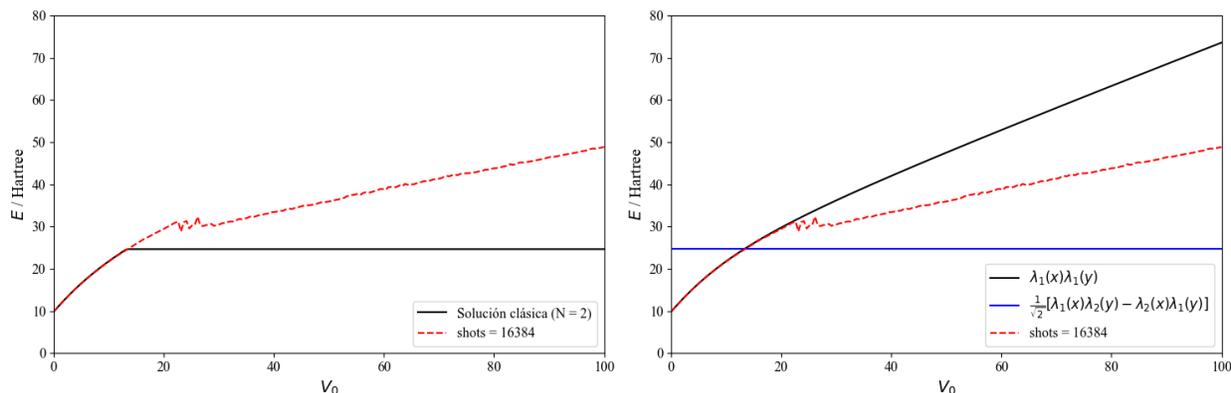


Figura 5.4: Simulación de la energía del estado fundamental de dos electrones en un pozo de potencial infinito con un potencial de contacto de interacción empleando un número de *shots* de 16384, una base con un tamaño $N = 2$ y el optimizador *COBYLA*. La comparación se realiza con una solución clásica para $N = 2$.

Los resultados representados en la Figura 5.4 revelan un problema significativo para las simulaciones de algoritmos cuánticos realizadas con valores de V_0 muy grandes. Cuando la interacción entre los electrones es fuerte, los valores de la energía obtenidos mediante simulaciones cuánticas no convergen a un valor constante como lo hacen los resultados obtenidos por métodos clásicos.

Además, los valores de la energía proporcionados por el algoritmo *VQE* tampoco coinciden con los autovalores del estado para el cual los dos electrones se encuentran en el estado $n = 1$. Esto es debido a que el *ansatz UCCSD*, empleado para hacer las simulaciones, tiene un parámetro que obliga a definir el spin, por lo tanto, al definir que las dos partículas tienen distinto spin, se limitan los estados de la base a los estados simétricos, haciendo que el autovector correspondiente al autovalor de menor energía, que es un estado antisimétrico, no esté dentro de la base, imposibilitando el cálculo de su energía mediante el algoritmo *VQE*. Sin embargo, este último punto no es relevante debido a que dichos autovalores convergen al nivel de energía al cual el sistema satura con las soluciones antisimétricas a medida que aumenta el tamaño de la base.

En la Figura C.2, se representan los autovalores de los estados formados por los primeros niveles de energía para una base de tamaño $N = 3$. En ella puede observarse como la solución para la cual los dos electrones se encuentran en el estado $n = 1$ se aproxima a la energía de saturación correspondiente al estado antisimétrico.

En la siguiente figura, puede observarse lo que sucede en las simulaciones para interacciones de mayor intensidad entre los electrones, con una base de un tamaño superior a la estudiada en el caso anterior.

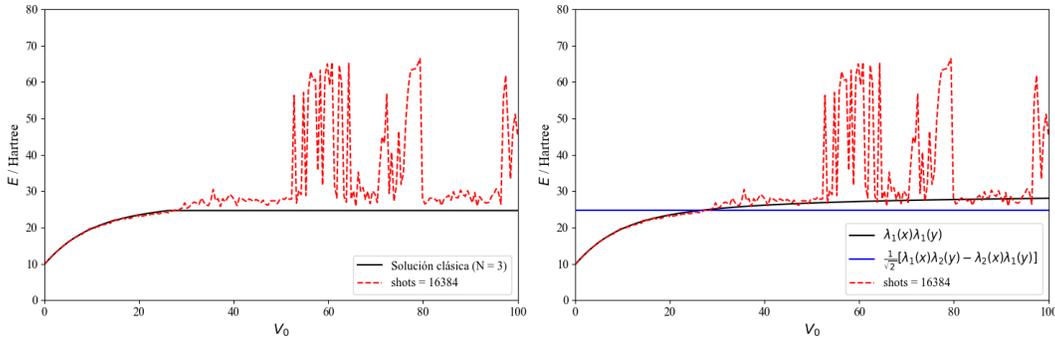


Figura 5.5: Simulación de la energía del estado fundamental de dos electrones en un pozo de potencial infinito con un potencial de contacto de interacción empleando un número de *shots* de 16384, una base con un tamaño $N = 3$ y el optimizador *COBYLA*. La comparación se realiza con una solución clásica para $N = 3$.

En la Figura 5.5, puede observarse como los resultados obtenidos con una base mayor que los de la Figura 5.4 siguen siendo inconsistentes con las soluciones teóricas para potenciales de interacción fuertes entre los electrones. Sin embargo, ciertos valores de la energía sí coinciden con los autovalores del estado para el cual los dos electrones se encuentran en el estado $n = 1$.

A partir de las simulaciones realizadas, representadas en las Figuras 5.4 - 5.5, se concluye con que para valores grandes de V_0 , el sistema estudiado no puede resolverse adecuadamente mediante métodos perturbativos, como es el caso de la segunda cuantización. Estos métodos suponen que la perturbación en el término de interacción es pequeña en comparación con el Hamiltoniano no perturbado. Para que la serie perturbativa funcione, debe converger, lo cual no sucede cuando la perturbación es grande.

En particular, el término de interacción es del orden de V_0 . Comparándolo con el término de energía de los estados en el pozo, que es del orden de 24 Hartree, las discrepancias comienzan a manifestarse cuando V_0 está en torno a valores de 25 y 30, indicando que en este régimen la aproximación perturbativa no es válida.

Por lo tanto, las simulaciones realizadas con el algoritmo *VQE* proporcionan unos resultados coherentes para valores pequeños de V_0 . La discrepancia observada para interacciones fuertes sugiere limitaciones de los métodos empleados para manejar estos casos de manera precisa y consistente con los métodos clásicos. Esto subraya la necesidad de investigar y desarrollar otros métodos que puedan capturar adecuadamente los efectos de las interacciones fuertes en sistemas cuánticos simulados y que sean capaces de hacerlo en tiempos computacionales razonables.

5.3. Simulaciones de algoritmos cuánticos con ruido

En esta sección, se realizan simulaciones de algoritmos cuánticos con ruido del sistema estudiado en las secciones anteriores.³

En la Figura 5.6, se muestra las diferentes simulaciones realizadas con los distintos modelos de ruido. Estas simulaciones han sido realizadas con los parámetros que han proporcionado los mejores resultados en las secciones anteriores: el *ansatz* *UCCSD* y el optimizador *COBYLA*.

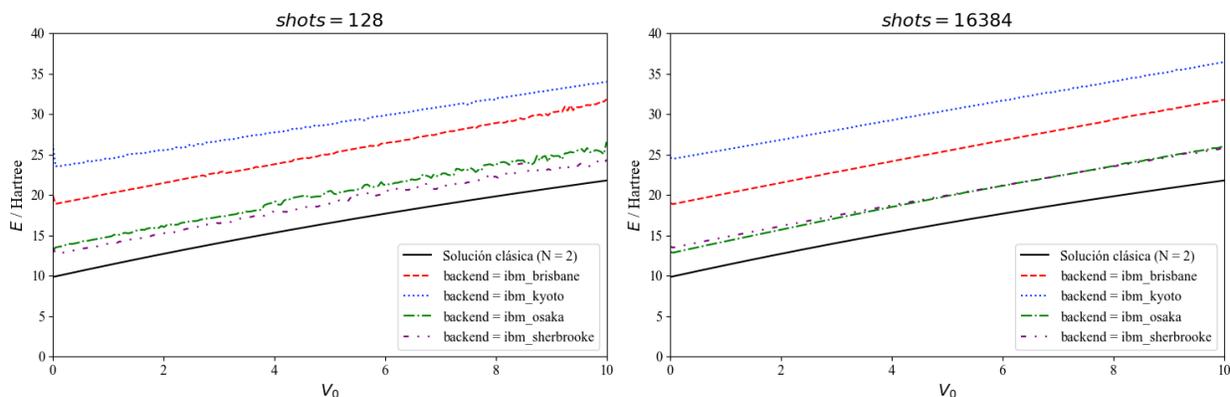


Figura 5.6: Simulación de la energía del estado fundamental de dos electrones en un pozo de potencial infinito con un potencial de contacto de interacción con diferentes modelos de ruido y valores del número de *shots*, empleando el optimizador *COBYLA* y un tamaño de base $N = 2$.

Al igual que las simulaciones con ruido realizadas en las secciones 3.2 y 4.3, el *backend* que proporciona unos mejores resultados es el de *sherbrook*.

5.4. Resumen

En las medidas realizadas mediante métodos clásicos del pozo infinito, se ha observado como la energía del sistema satura para valores grandes de V_0 , independientemente del tamaño de la base empleada, debido a que la contribución de la energía del potencial de interacción se anula para los estados antisimétricos.

Para las simulaciones realizadas con el algoritmo *VQE*, en las cuales se han estudiado los efectos de las interacciones entre varias partículas, los resultados obtenidos con los diferentes parámetros del algoritmo *VQE* han sido coherentes para valores pequeños de V_0 . Sin embargo, se han observado discrepancias para interacciones fuertes debido a que la segunda cuantización es un método perturbativo, el cual no es adecuado para describir este tipo de interacciones fuertes donde la energía de interacción entre las partículas es superior a la energía de los estados individuales de ambas partículas.

³https://github.com/juan-gomez-mazorra-uc/TFG/tree/main/results/3_potential_well/potential_well_noise_model.

Capítulo 6

Aplicación directa de la segunda cuantización

En los capítulos 4 y 5, el Hamiltoniano del sistema se ha obtenido mediante *Qiskit Nature* y las matrices h_{pq} y g_{pqrs} . En este capítulo, se ha demostrado como puede obtenerse el Hamiltoniano del sistema dado en el capítulo 5 mediante la segunda cuantización, sin emplear ninguna librería externa. Para simplificar los cálculos, se ha restringido el sistema a estados $n = 1$ y $n = 2$.

6.1. Base del Hamiltoniano individual

El Hamiltoniano del sistema, \hat{H}_t , viene dado por los Hamiltonianos individuales de la primera partícula, $\hat{H}(1)$, y la segunda partícula, $\hat{H}(2)$.

$$\hat{H}_t = \hat{H}(1) + \hat{H}(2) \quad (6.1)$$

La base del Hamiltoniano individual, compuesta por las funciones de onda espaciales y de espín, es

$$\{|1\rangle_i = |1, +\rangle, \quad |2\rangle_i = |1, -\rangle, \quad |3\rangle_i = |2, +\rangle, \quad |4\rangle_i = |2, -\rangle\} \quad (6.2)$$

Donde i hace referencia al estado individual.

Por lo tanto, como las partículas del sistema son fermiones, la base del Hamiltoniano total viene dado por estados antisimétricos.

$$\{|1\rangle_t, \quad |2\rangle_t, \quad |3\rangle_t, \quad |4\rangle_t, \quad |5\rangle_t, \quad |6\rangle_t\} \quad (6.3)$$

Donde t hace referencia al estado total. A continuación, se definen cada uno de los estados de esta base, junto a su equivalencia en la notación de ocupación $|\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4\rangle$ (2.10).

$$|1\rangle_t = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1\rangle_i \otimes |2\rangle_i - |2\rangle_i \otimes |1\rangle_i] = |1, 1, 0, 0\rangle \quad (6.4)$$

$$|2\rangle_t = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1\rangle_i \otimes |3\rangle_i - |3\rangle_i \otimes |1\rangle_i] = |1, 0, 1, 0\rangle \quad (6.5)$$

$$|3\rangle_t = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1\rangle_i \otimes |4\rangle_i - |4\rangle_i \otimes |1\rangle_i] = |1, 0, 0, 1\rangle \quad (6.6)$$

$$|4\rangle_t = \frac{1}{\sqrt{2}} [|2\rangle_i \otimes |3\rangle_i - |3\rangle_i \otimes |2\rangle_i] = |0, 1, 1, 0\rangle \quad (6.7)$$

$$|5\rangle_t = \frac{1}{\sqrt{2}} [|2\rangle_i \otimes |4\rangle_i - |4\rangle_i \otimes |2\rangle_i] = |0, 1, 0, 1\rangle \quad (6.8)$$

$$|6\rangle_t = \frac{1}{\sqrt{2}} [|3\rangle_i \otimes |4\rangle_i - |4\rangle_i \otimes |3\rangle_i] = |0, 0, 1, 1\rangle \quad (6.9)$$

Con los estados de la base de \hat{H}_t , se obtienen los elementos de la matriz de dicho Hamiltoniano. A partir de ahora, se emplearán índices latinos para los estados totales y los griegos para los individuales.

$$H_{ij} = {}_t\langle i | \hat{H} | j \rangle_t \quad (6.10)$$

$$\begin{aligned} \hat{H} | j \rangle_t &= [\hat{H}(1) + \hat{H}(2)] | j \rangle_t = \frac{1}{\sqrt{2}} [\hat{H}(1) + \hat{H}(2)] [| \alpha^j \rangle_i \otimes | \beta^j \rangle_i - | \beta^j \rangle_i \otimes | \alpha^j \rangle_i] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\hat{H}(1) | \alpha^j \rangle_i \otimes | \beta^j \rangle_i + | \alpha^j \rangle_i \otimes \hat{H}(2) | \beta^j \rangle_i - \hat{H}(1) | \beta^j \rangle_i \otimes | \alpha^j \rangle_i - | \beta^j \rangle_i \otimes \hat{H}(2) | \alpha^j \rangle_i \right] \end{aligned}$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned} H_{ij} = {}_t\langle i | \hat{H} | j \rangle_t &= \frac{1}{2} \left[{}_i\langle \alpha^i | \hat{H}(1) | \alpha^j \rangle_i {}_i\langle \beta^i | \beta^j \rangle_i + {}_i\langle \alpha^i | \alpha^j \rangle_i {}_i\langle \beta^i | \hat{H}(2) | \beta^j \rangle_i \right. \\ &\quad - {}_i\langle \alpha^i | \hat{H}(1) | \beta^j \rangle_i {}_i\langle \beta^i | \alpha^j \rangle_i - {}_i\langle \alpha^i | \beta^j \rangle_i {}_i\langle \beta^i | \hat{H}(2) | \alpha^j \rangle_i \\ &\quad - {}_i\langle \beta^i | \hat{H}(1) | \alpha^j \rangle_i {}_i\langle \alpha^i | \beta^j \rangle_i - {}_i\langle \beta^i | \alpha^j \rangle_i {}_i\langle \alpha^i | \hat{H}(2) | \beta^j \rangle_i \\ &\quad \left. + {}_i\langle \beta^i | \hat{H}(1) | \beta^j \rangle_i {}_i\langle \alpha^i | \alpha^j \rangle_i + {}_i\langle \beta^i | \beta^j \rangle_i {}_i\langle \alpha^i | \hat{H}(2) | \alpha^j \rangle_i \right] \end{aligned}$$

Sabiendo que ${}_i\langle \alpha^i | \hat{H}(1) | \beta^j \rangle_i = h_{\alpha^i \beta^j}$ y ${}_i\langle \alpha^i | \beta^j \rangle_i = \delta_{\alpha^i \beta^j}$.

$$\begin{aligned} H_{ij} = {}_t\langle i | \hat{H} | j \rangle_t &= \frac{1}{2} \left[h_{\alpha^i \alpha^j} \delta_{\beta^i \beta^j} + \delta_{\alpha^i \alpha^j} h_{\beta^i \beta^j} \right. \\ &\quad - h_{\alpha^i \beta^j} \delta_{\beta^i \alpha^j} - \delta_{\alpha^i \beta^j} h_{\beta^i \alpha^j} \\ &\quad - h_{\beta^i \alpha^j} \delta_{\alpha^i \beta^j} - \delta_{\beta^i \alpha^j} h_{\alpha^i \beta^j} \\ &\quad \left. + h_{\beta^i \beta^j} \delta_{\alpha^i \alpha^j} + \delta_{\beta^i \beta^j} h_{\alpha^i \alpha^j} \right] \end{aligned}$$

Concluyendo con

$$H_{ij} = h_{\alpha^i \alpha^j} \delta_{\beta^i \beta^j} + h_{\beta^i \beta^j} \delta_{\alpha^i \alpha^j} - h_{\alpha^i \beta^j} \delta_{\beta^i \alpha^j} - h_{\beta^i \alpha^j} \delta_{\alpha^i \beta^j} \quad (6.11)$$

6.2. Segunda cuantización

Para demostrar el motivo por el cual se cumple la igualdad (2.17), hay que obtener la Ecuación (6.11) empleando los operadores de creación, \hat{a}_i^\dagger , y destrucción, \hat{a}_i . Estos operadores forman parte de un espacio de Hilbert diferente al de las bases individual (6.2) y total (6.3), por lo tanto, operan sobre estados que no forman parte de estas bases. Estos operadores operan sobre todo el espacio que puede describirse con la notación de ocupación, cuya base (6.12) está formada por 16 estados.

$$\{|0, 0, 0, 0\rangle, |1, 0, 0, 0\rangle, \dots |1, 1, 1, 1\rangle\} \quad (6.12)$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned} H_{ij} &= {}_t\langle i | \hat{H} | j \rangle_t = \langle \alpha^i \beta^i | \hat{H} | \alpha^j \beta^j \rangle = \langle \hat{a}_{\alpha^i}^\dagger \hat{a}_{\beta^i}^\dagger \Omega | \hat{H} | \hat{a}_{\alpha^j}^\dagger \hat{a}_{\beta^j}^\dagger \Omega \rangle = \langle \Omega | \hat{a}_{\alpha^i} \hat{a}_{\beta^i} \hat{H} \hat{a}_{\alpha^j}^\dagger \hat{a}_{\beta^j}^\dagger | \Omega \rangle \\ &= \langle \Omega | \hat{a}_{\alpha^i} \hat{a}_{\beta^i} \left(\sum_{p,q} h_{pq} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q + \frac{1}{2} \sum_{p,q,r,s} g_{pqrs} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_r \hat{a}_s \right) \hat{a}_{\alpha^j}^\dagger \hat{a}_{\beta^j}^\dagger | \Omega \rangle = H_{ij}(h_{pq}) + H_{ij}(g_{pqrs}) \end{aligned}$$

Se va a demostrar la contribución de la integral de un cuerpo, $H_{ij}(h_{pq})$. Para ello, se han empleado las relaciones de anticonmutación (2.16). La contribución de la integral de dos cuerpos, $H_{ij}(g_{pqrs})$, se obtiene de manera análoga.

$$\begin{aligned} H_{ij}(h_{pq}) &= \sum_{p,q} h_{pq} \langle \Omega | \hat{a}_{\alpha^i} \hat{a}_{\beta^i} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q \hat{a}_{\alpha^j}^\dagger \hat{a}_{\beta^j}^\dagger | \Omega \rangle = \sum_{p,q} h_{pq} \langle \Omega | \hat{a}_{\alpha^i} \hat{a}_{\beta^i} \hat{a}_p^\dagger (\delta_{q\alpha^j} - \hat{a}_{\alpha^j}^\dagger \hat{a}_q) \hat{a}_{\beta^j}^\dagger | \Omega \rangle \\ &= \sum_{p,q} h_{pq} \langle \Omega | \hat{a}_{\alpha^i} \hat{a}_{\beta^i} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_{\beta^j}^\dagger | \Omega \rangle \delta_{q\alpha^j} - \sum_{p,q} h_{pq} \langle \Omega | \hat{a}_{\alpha^i} \hat{a}_{\beta^i} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_{\alpha^j}^\dagger (\delta_{q\beta^j} - \hat{a}_{\beta^j}^\dagger \hat{a}_q) | \Omega \rangle \end{aligned}$$

Dado que $\hat{a}_q |\Omega\rangle = 0$, el último término de la expresión anterior se anula.

$$\begin{aligned} H_{ij}(h_{pq}) &= \sum_{p,q} h_{pq} \langle \Omega | \hat{a}_{\alpha^i} \hat{a}_{\beta^i} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_{\beta^j}^\dagger | \Omega \rangle \delta_{q\alpha^j} - \sum_{p,q} h_{pq} \langle \Omega | \hat{a}_{\alpha^i} \hat{a}_{\beta^i} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_{\alpha^j}^\dagger | \Omega \rangle \delta_{q\beta^j} \\ &= \sum_p h_{p\alpha^j} \langle \alpha^i \beta^i | p \beta^j \rangle - \sum_p h_{p\beta^j} \langle \alpha^i \beta^i | p \alpha^j \rangle \end{aligned}$$

Sabiendo que los estados totales cumplen la condiciones $\langle \alpha\beta | \alpha\beta \rangle = 1$ y $\langle \alpha\beta | \beta\alpha \rangle = -1$. En base a ello, $\langle \alpha\beta | \gamma\mu \rangle = \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\mu} - \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\gamma}$.

$$\begin{aligned} H_{ij}(h_{pq}) &= \sum_p h_{p\alpha^j} (\delta_{\alpha^i p} \delta_{\beta^i \beta^j} - \delta_{\alpha^i \beta^j} \delta_{\beta^i p}) - \sum_p h_{p\beta^j} (\delta_{\alpha^i p} \delta_{\beta^i \alpha^j} - \delta_{\alpha^i \alpha^j} \delta_{\beta^i p}) \\ &= h_{\alpha^i \alpha^j} \delta_{\beta^i \beta^j} + h_{\beta^i \beta^j} \delta_{\alpha^i \alpha^j} - h_{\alpha^i \beta^j} \delta_{\beta^i \alpha^j} - h_{\beta^i \alpha^j} \delta_{\alpha^i \beta^j} \end{aligned} \quad (6.13)$$

Lo cual coincide con el resultado obtenido mediante la base del Hamiltoniano individual (6.11).

6.3. Resultados

Con la notación de ocupación, es posible asignar un qubit para cada orbital, al igual que se ha visto con la transformación de Jordan-Wigner (2.20), en la cual el estado de cada qubit denota si un orbital se encuentra ocupado o desocupado.

En el capítulo 5, se empleó la librería *Qiskit Nature* y la transformación de Jordan-Wigner para poder expresar el Hamiltoniano del sistema en términos de las matrices de Pauli. En este caso, se han obtenido los coeficientes del Hamiltoniano total del sistema dado en el capítulo 5 a partir de los coeficientes h_{pq} y g_{pqrs} sin emplear la librería *Qiskit Nature*.¹ Tras obtener el Hamiltoniano, sería posible implementar el algoritmo *VQE* de *Qiskit* utilizando únicamente el minimizador. Sin embargo, esto requiere la capacidad de generar una función de onda de *ansatz* que garantice estados únicamente de dos partículas.

Al haber empleado los operadores de creación y destrucción, el Hamiltoniano total del sistema, como se ha comentado anteriormente, viene descrito por una base de 16 estados. Sin embargo, el Hamiltoniano del sistema de los dos electrones viene descrito por la siguiente base de 6 estados, escritos con la notación de ocupación.

$$\{|1, 1, 0, 0\rangle, |1, 0, 1, 0\rangle, |1, 0, 0, 1\rangle, |0, 1, 1, 0\rangle, |0, 1, 0, 1\rangle, |0, 0, 1, 1\rangle\} \quad (6.14)$$

Los otros 10 estados de la base (6.12) no describen un sistema compuesto por dos partículas, por lo tanto, no se desean obtener sus autovalores al emplear el algoritmo *VQE*. Una opción para poder limitar los estados de la base a aquellos en los cuales solo están presentes dos partículas es emplear el *ansatz* *UCCSD*, como se ha hecho en el resto de las simulaciones. Sin embargo, crear este *ansatz* sin emplear ninguna librería externa supondría un proceso complejo, excediendo el alcance de este trabajo.

A pesar de no haber realizado las simulaciones con el algoritmo *VQE*, se ha obtenido el Hamiltoniano total a partir de la segunda cuantización.² En este ejemplo, se ha tomado un potencial de contacto con un valor de $V_0 = 1$ y se ha obtenido el siguiente Hamiltoniano expresado en términos de la matriz identidad, I , y de las matrices de Pauli (1.9).

$$\begin{aligned} \hat{H} = & 25,924011 \cdot IIII - 3,0924011 \cdot IIIZ - 10,4946044 \cdot IIZI \\ & - 3,0924011 \cdot IZII - 10,4946044 \cdot ZIII + 0,375 \cdot IZIZ \\ & + 0,25 \cdot ZIIZ + 0,25 \cdot IZZI + 0,375 \cdot ZIZI \\ & + 0,25 \cdot YYYYY - 0,25 \cdot XXYY - 0,25 \cdot YYXX + 0,25 \cdot XXXX \end{aligned} \quad (6.15)$$

Este Hamiltoniano es equivalente al obtenido con *Qiskit Nature*, considerando las mismas fases para los autoestados.

¹https://github.com/juan-gomez-mazorra-uc/TFG/blob/main/results/4_secon_quantization/matrix.py.

²https://github.com/juan-gomez-mazorra-uc/TFG/blob/main/results/4_secon_quantization/hamiltonian.ipynb.

Capítulo 7

Conclusiones

Este trabajo ha permitido comprender los fundamentos teóricos de la computación cuántica y de uno de los algoritmos cuánticos más empleados, el algoritmo *VQE*. Se han realizado simulaciones de este algoritmo mediante *Qiskit*, una de las herramientas de código abierto más utilizadas en el área de la computación cuántica, junto con librerías complementarias como *Qiskit Nature* y *Qiskit Algorithms*.

Mediante las simulaciones del algoritmo *VQE*, se han resuelto tres sistemas cuánticos sencillos: la molécula de hidrógeno, un electrón en un potencial de Yukawa y dos electrones en un pozo de potencial infinito con un potencial de interacción de contacto. Los resultados obtenidos han sido comparados con los dados por algoritmos clásicos.

Para comenzar, se ha implementado la librería *Qiskit Nature* para la resolución del sistema de la molécula de hidrógeno. En este contexto, se han estudiado aspectos fundamentales de la computación cuántica, centrándose en algunos parámetros que conforman el algoritmo *VQE*: el *ansatz*, el optimizador, el número de *shots* y el punto de partida del *ansatz*. Con todas las simulaciones realizadas, se ha concluido con que los parámetros que han devuelto mejores resultados han sido el *ansatz UCCSD*, el optimizador *COBYLA* y un número elevado de *shots*.

Después del estudio de un sistema dado directamente por la librería *Qiskit Nature*, se ha implementado un sistema mediante la segunda cuantización, estudiando un sistema con una partícula, el potencial de Yukawa. Para ello, se han calculado las integrales de un cuerpo con las cuales se ha obtenido el Hamiltoniano del sistema mediante la segunda cuantización, empleando *Qiskit Nature*. Se ha estudiado dicho sistema variando el parámetro de apantallamiento del potencial con el objetivo de obtener su valor crítico, para el cual dejan de existir estados ligados. Se han empleado diferentes parámetros de computación para observar las diferencias entre los resultados. Los parámetros con los cuales se han obtenido unos mejores resultados han sido el optimizador *COBYLA*, un número elevado de *shots* y un tamaño de base grande. Estos resultados también han permitido observar cómo el rendimiento de las simulaciones cuánticas puede variar significativamente entre diferentes simulaciones, especialmente a medida que aumenta el tamaño de la base, debido al ruido y las fluctuaciones estadísticas.

Posteriormente, se ha estudiado un sistema de dos partículas, el pozo de potencial infinito con una repulsión de contacto, empleando nuevamente la segunda cuantización. Además de las integrales de un cuerpo, se han tenido que calcular las integrales de dos cuerpos para obtener el Hamiltoniano del sistema. Se ha estudiado la energía del nivel fundamental en función de la intensidad de la repulsión entre las partículas. Al igual que en el estudio del sistema anterior, se han empleado diferentes parámetros de computación. Los resultados obtenidos muestran discrepancias para repulsiones fuertes entre las partículas, ya que la segunda cuantización es un método perturbativo, que no es adecuado para describir grandes perturbaciones. Sin embargo, para bajas energías de repulsión, las simulaciones han devuelto resultados similares a los obtenidos con algoritmos clásicos.

En todos los sistemas estudiados se han realizado simulaciones con modelos de ruido de ordenadores cuánticos de *IBM*. En todos los casos, la implementación de los modelos de ruido empeora los resultados obtenidos de manera significativa, sobre todo en el caso de la molécula de hidrógeno, lo cual puede ser debido a la complejidad del sistema molecular simulado. Esto sugiere que dichas simulaciones pueden ser mejoradas mediante ajustes en los parámetros de simulación. Un enfoque para mejorar los resultados en las estas simulaciones podría incluir la realización de más simulaciones empleando diferentes *ansatz* para intentar encontrar alguno más resistente al ruido que el *ansatz UCCSD*. También podrían realizarse simulaciones con optimizadores alternativos a *COBYLA*, buscando optimizadores más efectivos en la convergencia en presencia de ruido.

Finalmente, se ha realizado un desarrollo teórico de la segunda cuantización para el sistema del pozo de potencial infinito con una repulsión de contacto. Con ello, se ha demostrado que los Hamiltonianos de los sistemas estudiados de una y dos partículas podrían haberse obtenido sin la necesidad de emplear *Qiskit Nature*.

Además de los estudios anteriores, se intentó realizar una comparación del aumento de los tiempos de ejecución entre un ordenador clásico y uno cuántico a medida que la complejidad del sistema incrementa. Aunque no se pudiera finalizar dicho estudio, se pudieron ejecutar circuitos cuánticos en un ordenador cuántico de *IBM*.

Estos resultados han demostrado que la computación cuántica es una tecnología prometedora para resolver problemas complejos que son computacionalmente inmanejables para los ordenadores tradicionales. Sin embargo, aún quedan avances significativos por hacer antes de que los ordenadores cuánticos sean más eficientes que los clásicos. Actualmente, los qubits físicos empleados en los ordenadores cuánticos son muy ruidosos y propensos a errores, lo que limita la fiabilidad de los resultados. Un paso crucial hacia la computación cuántica a gran escala y sin errores es la creación de qubits lógicos, que consisten en conjuntos de qubits físicos organizados para corregir errores de manera colectiva. [7] Se estima que se necesitan alrededor de 1000 qubits físicos para crear un solo qubit lógico. Por lo tanto, a pesar de los avances significativos, como el desarrollo de ordenadores cuánticos con miles de qubits físicos, el desarrollo de esta tecnología todavía se encuentra lejos de disponer de sistemas que puedan aprovechar plenamente su potencial. A pesar de estos desafíos, se ha observado a lo largo del trabajo el gran potencial de la computación cuántica para transformar radicalmente numerosos campos científicos y tecnológicos.

Bibliografía

- [1] Nielsen, M. A. y Chuang, I. L. *Quantum Computation and Quantum Information* 10th Anniversary ed. (Cambridge University Press, 2010).
- [2] Manin, Y. Computable and uncomputable. *Sovetskoye Radio, Moscow* **128**, 15 (1980).
- [3] Benioff, P. The computer as a physical system: A microscopic quantum mechanical Hamiltonian model of computers as represented by Turing machines. *Journal of Statistical Physics* **22**, 563-591 (1980).
- [4] Feynman, R. P. Simulating physics with computers. *International Journal of Theoretical Physics* **21**, 467-488. ISSN: 1572-9575 (1982).
- [5] Shor, P. W. Polynomial-Time Algorithms for Prime Factorization and Discrete Logarithms on a Quantum Computer. *SIAM Journal on Computing* **26**, 1484–1509. ISSN: 1095-7111 (1997).
- [6] Qiskit contributors. *Qiskit Textbook* (2023).
- [7] Gidney, C. y Ekerå, M. How to factor 2048 bit RSA integers in 8 hours using 20 million noisy qubits. *Quantum* **5**, 433. ISSN: 2521-327X (2021).
- [8] Qiskit contributors. *Qiskit: An Open-source Framework for Quantum Computing* ver. 1.0.2.
- [9] IBM. *IBM Quantum Platform*
- [10] Qiskit Nature developers and contributors. *Qiskit Nature* ver. 0.7.2.
- [11] Qiskit Algorithms developers and contributors. *Qiskit Algorithms* ver. 0.3.0.
- [12] Qiskit contributors. *Qiskit Aer* ver. 0.14.0.1.
- [13] Qiskit contributors. *Qiskit IBM Runtime* ver. 0.14.0.1.
- [14] Vaquero Sabater, N. Simulating molecules with variational quantum eigensolvers (2022).
- [15] Peruzzo, A. y col. A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor. *Nature Communications* **5**, 4213. ISSN: 2041-1723 (2014).
- [16] Tilly, J. y col. The Variational Quantum Eigensolver: A review of methods and best practices. *Physics Reports* **986**. The Variational Quantum Eigensolver: a review of methods and best practices, 1-128. ISSN: 0370-1573 (2022).
- [17] Bartlett, R. J. y Musiał, M. Coupled-cluster theory in quantum chemistry. *Rev. Mod. Phys.* **79**, 291-352 (2007).
- [18] Fedorov, D. A., Alexeev, Y., Gray, S. K. y Otten, M. Unitary Selective Coupled-Cluster Method. *Quantum* **6**, 703. ISSN: 2521-327X (2022).

- [19] Xia, R. y Kais, S. *Qubit coupled cluster singles and doubles variational quantum eigensolver ansatz for electronic structure calculations* 2020.
- [20] Chatterjee, Y., Bourreau, E. y Rančić, M. J. *Solving various NP-Hard problems using exponentially fewer qubits on a Quantum Computer* 2024.
- [21] Powell, M. J. D. *A Direct Search Optimization Method That Models the Objective and Constraint Functions by Linear Interpolation* en *Advances in Optimization and Numerical Analysis* (1994), 51-67.
- [22] Singh, H., Majumder, S. y Mishra, S. Benchmarking of different optimizers in the variational quantum algorithms for applications in quantum chemistry. *The Journal of Chemical Physics* **159**. ISSN: 1089-7690 (2023).
- [23] Spall, J. C. An Overview of the Simultaneous Perturbation Method for Efficient Optimization. *Johns Hopkins Apl Technical Digest* **19**, 482-492 (1998).
- [24] Kraft, D. *A Software Package for Sequential Quadratic Programming* (Wiss. Berichtswesen d. DFVLR, 1988).
- [25] Altland, A. y Simons, B. D. en *Condensed Matter Field Theory* 39–94 (Cambridge University Press, 2010).
- [26] Jordan, P. y Wigner, E. Über das Paulische Äquivalenzverbot. *Zeitschrift für Physik* **47**, 631-651 (1928).
- [27] Tranter, A., Love, P. J., Mintert, F. y Coveney, P. V. A Comparison of the Bravyi–Kitaev and Jordan–Wigner Transformations for the Quantum Simulation of Quantum Chemistry. *Journal of Chemical Theory and Computation* **14**, 5617-5630 (2018).
- [28] YUKAWA, H. On the Interaction of Elementary Particles. I. *Proceedings of the Physico Mathematical Society of Japan. 3rd Series* **17**, 48-57 (1935).
- [29] Schwinger, J. On the Bound States of a Given Potential. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **47**, 122-129 (1961).
- [30] Edwards, J. P., Gerber, U., Schubert, C., Trejo, M. A. y Weber, A. The Yukawa potential: ground state energy and critical screening. *Progress of Theoretical and Experimental Physics* **2017**, 083A01. ISSN: 2050-3911 (2017).
- [31] Jaffe, R. L. *Supplementary Notes on Dirac Notation, Quantum States, Etc.* (1996).
- [32] Gomes, O. A., Chacham, H. y Mohallem, J. R. Variational calculations for the bound-unbound transition of the Yukawa potential. *Phys. Rev. A* **50**, 228-231 (1994).
- [33] IBM. *IBM Quantum Learning - Variational quantum eigensolver*

Apéndice A

Molécula de hidrógeno

En este apéndice, se muestran las simulaciones de la energía del estado fundamental de la molécula de hidrógeno empleando diferentes *ansatz*, optimizadores y valores del número de *shots*.

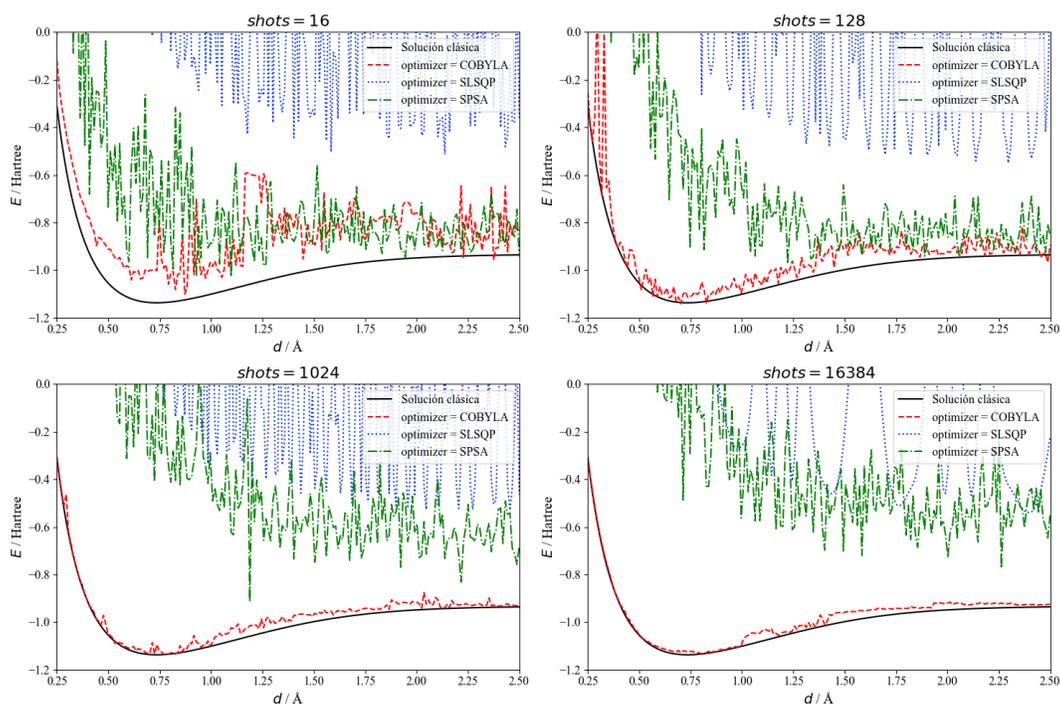


Figura A.1: Simulación de la energía del estado fundamental de la molécula de H_2 con diferentes optimizadores y valores del número de *shots* empleando el *ansatz TwoLocal*.

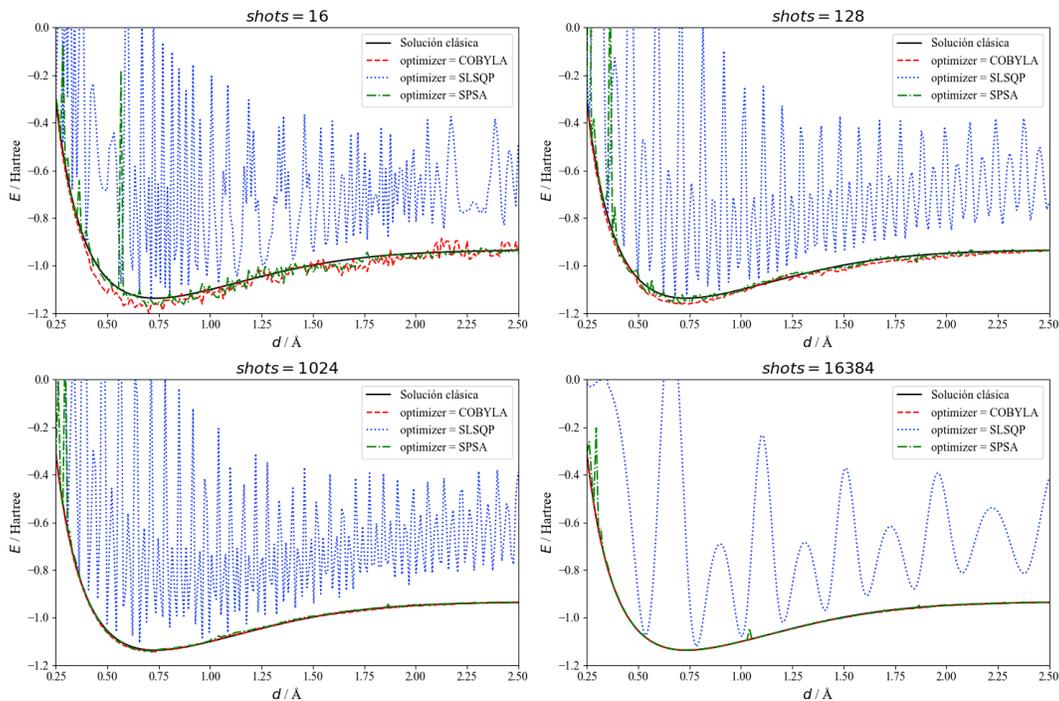


Figura A.2: Simulación de la energía del estado fundamental de la molécula de H_2 con diferentes optimizadores y valores del número de *shots* empleando el *ansatz* *UCCSD*.

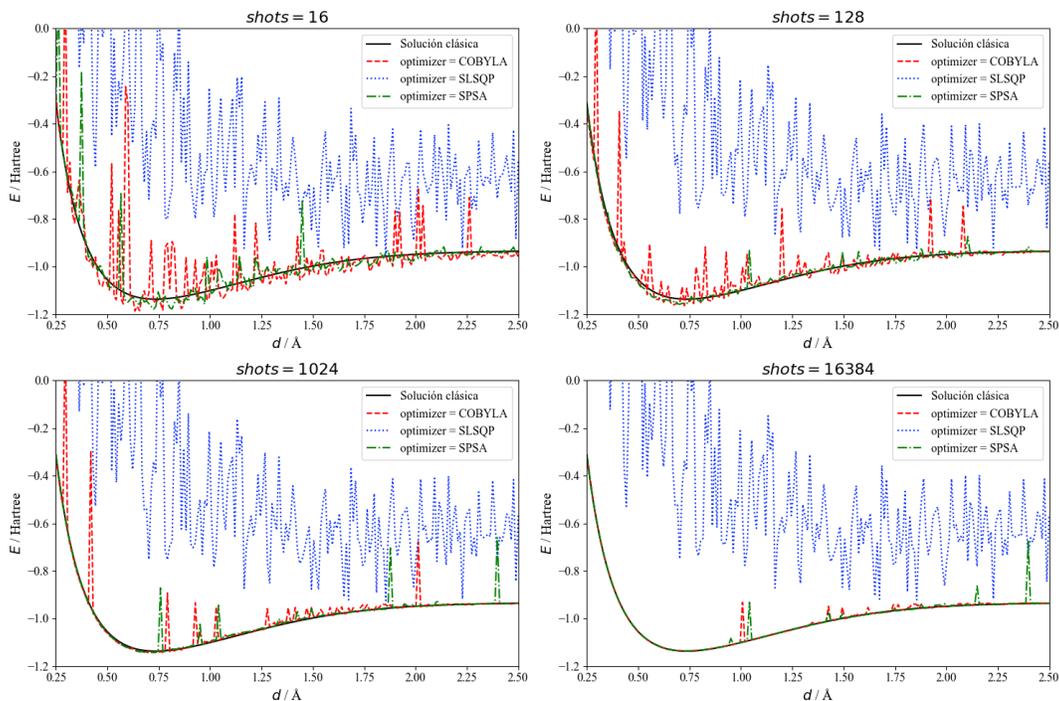


Figura A.3: Simulación de la energía del estado fundamental de la molécula de H_2 con diferentes optimizadores y valores del número de *shots* empleando el *ansatz* *UCCSD* sin definir el punto de partida para la búsqueda del valor propio mínimo.

Apéndice B

Potencial de Yukawa

En este apéndice, se muestran las simulaciones de la energía del estado fundamental de un electrón en el potencial de Yukawa empleando diferentes optimizadores, valores del número de *shots* y tamaños de la base.

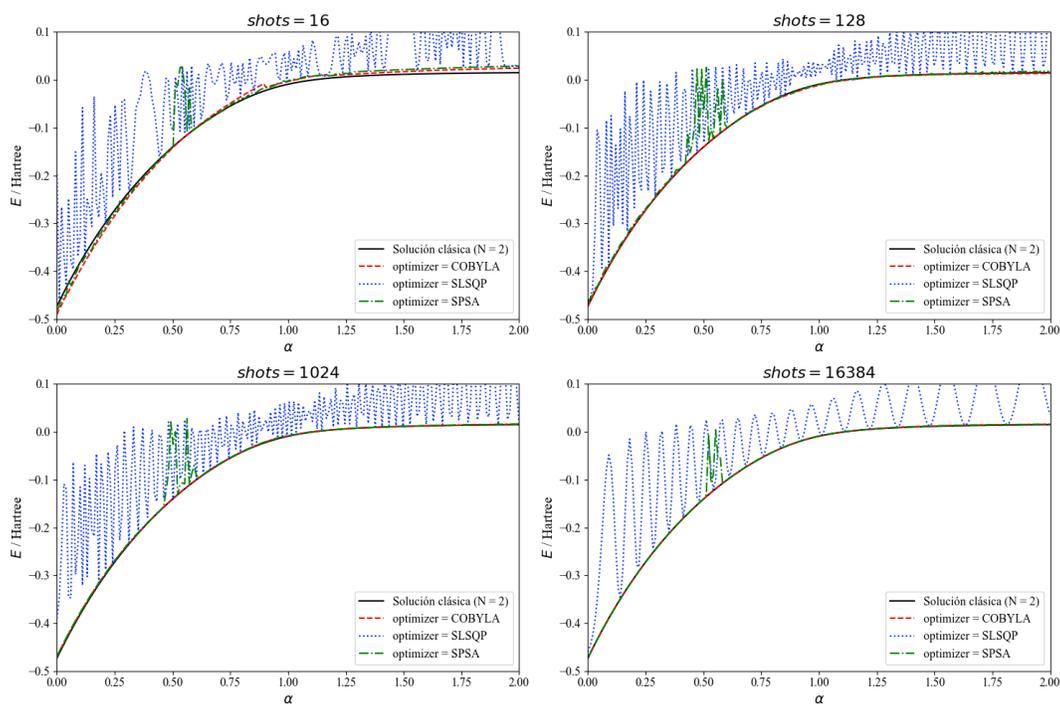


Figura B.1: Simulación de la energía del estado fundamental de un electrón en el potencial de Yukawa con diferentes optimizadores y valores del número de *shots* empleando una base con un tamaño $N = 2$.

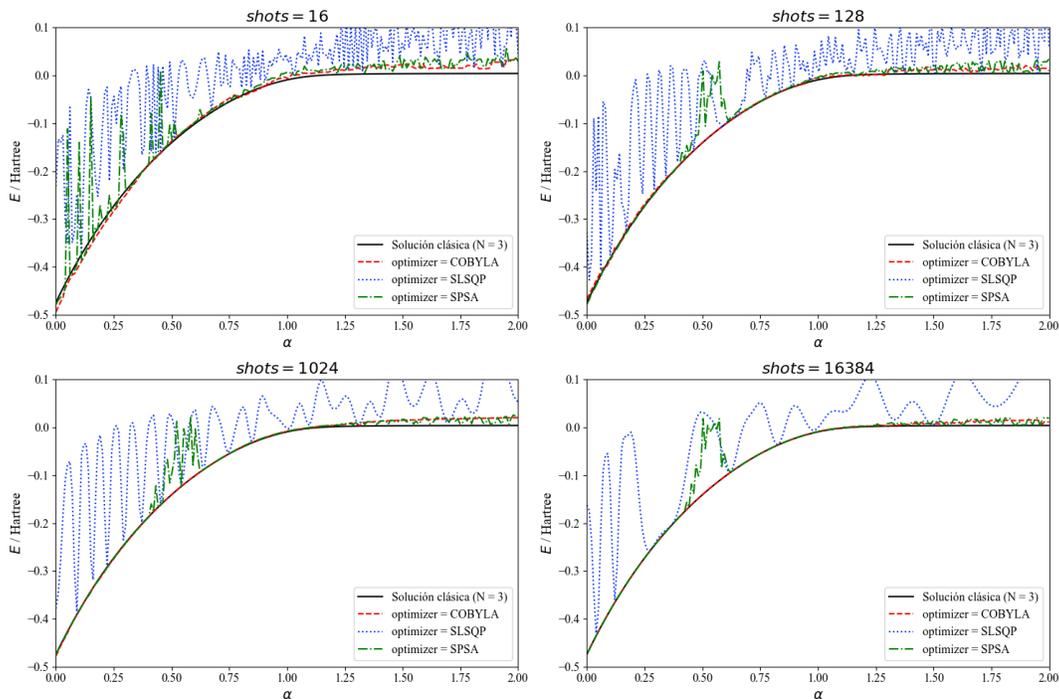


Figura B.2: Simulación de la energía del estado fundamental de un electrón en el potencial de Yukawa con diferentes optimizadores y valores del número de *shots* empleando una base con un tamaño $N = 3$.

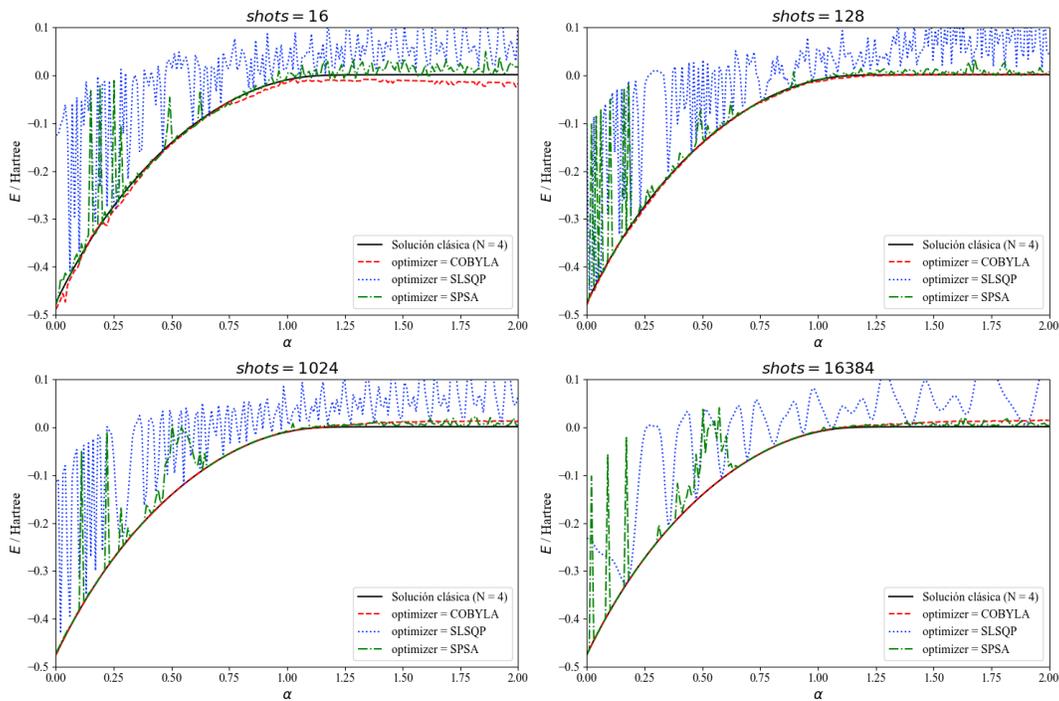


Figura B.3: Simulación de la energía del estado fundamental de un electrón en el potencial de Yukawa con diferentes optimizadores y valores del número de *shots* empleando una base con un tamaño $N = 4$.

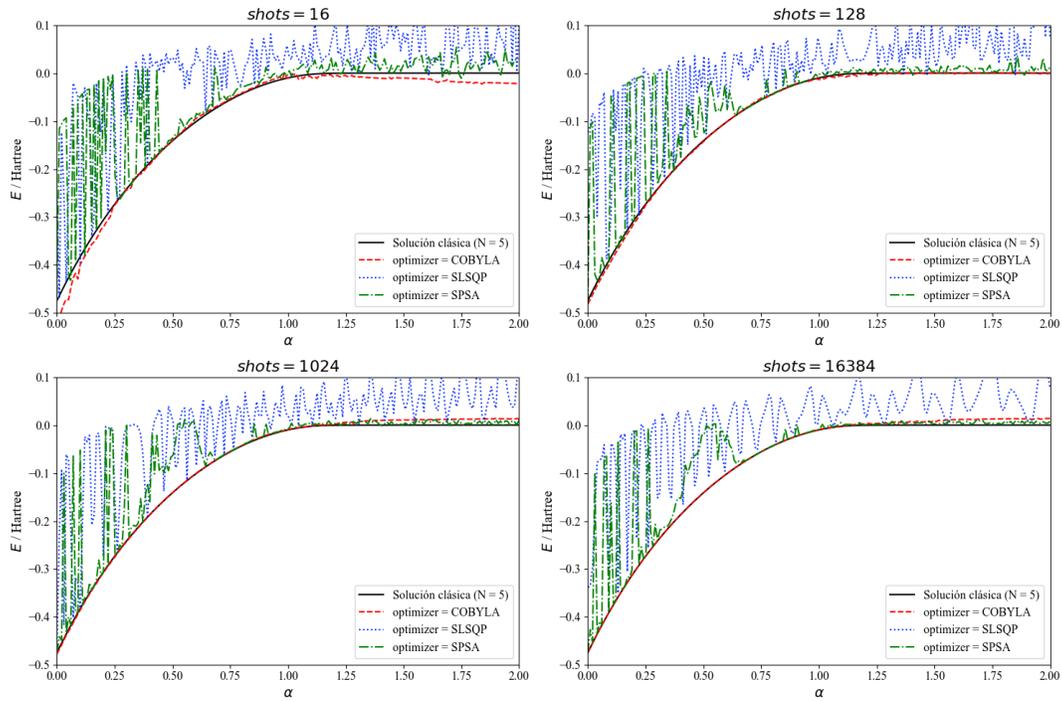


Figura B.4: Simulación de la energía del estado fundamental de un electrón en el potencial de Yukawa con diferentes optimizadores y valores del número de *shots* empleando una base con un tamaño $N = 5$.

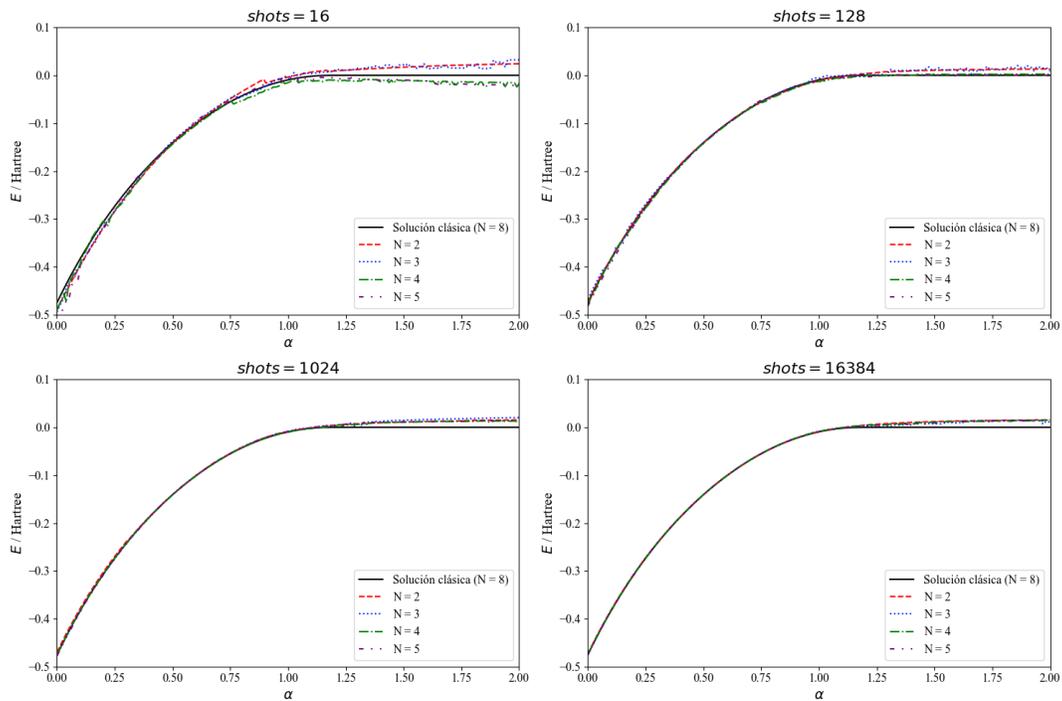


Figura B.5: Simulación de la energía del estado fundamental de un electrón en el potencial de Yukawa con diferentes valores del número de *shots* y tamaños de la base, empleando el optimizador *COBYLA*.

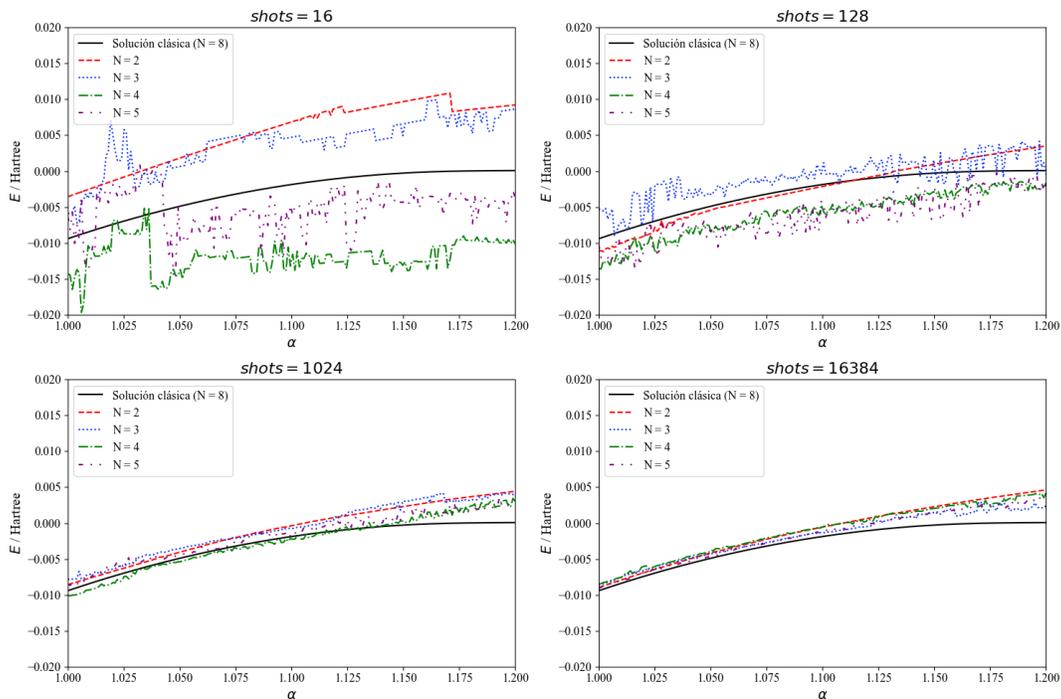


Figura B.6: Simulación de la energía del estado fundamental de un electrón en el potencial de Yukawa con valores del número de *shots* y tamaños de la base, empleando el optimizador *COBYLA*.

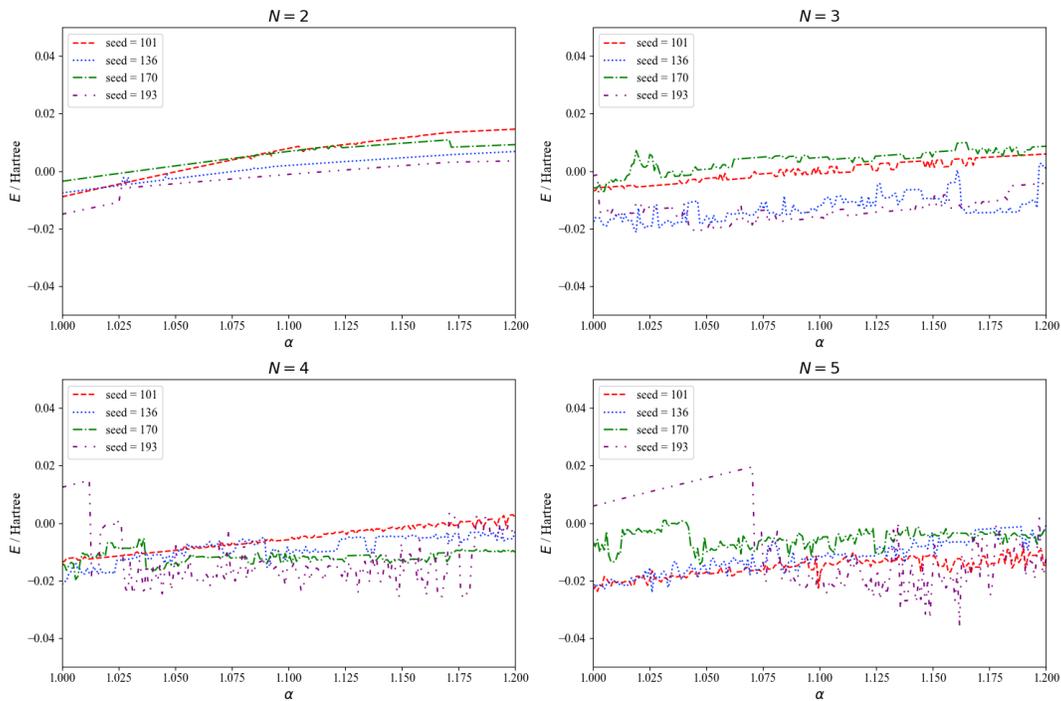


Figura B.7: Simulación de la energía del estado fundamental de un electrón en el potencial de Yukawa con diferentes valores de la semilla y tamaños de la base, empleando el optimizador *COBYLA* y 16 *shots*.

Apéndice C

Pozo de potencial infinito

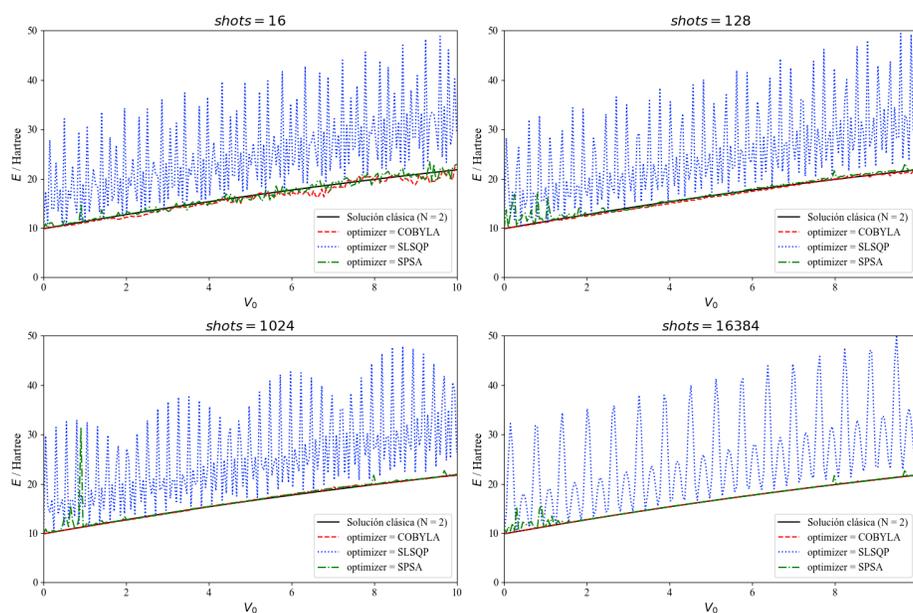


Figura C.1: Simulación de la energía del estado fundamental de dos electrones en un pozo de potencial infinito con un potencial de contacto de interacción con diferentes optimizadores y valores del número de *shots* empleando una base con un tamaño $N = 2$.

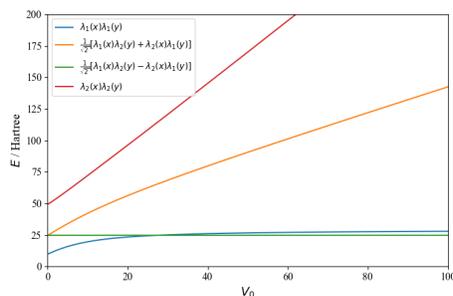


Figura C.2: Energía de los diferentes estados del sistema conformado por dos electrones en un pozo de potencial infinito de longitud $L = 1$, con un potencial de contacto de interacción para un tamaño de base $N = 3$.

C.1. Métodos clásicos

En esta sección se explica el procedimiento seguido para obtener los autovalores del Hamiltoniano del sistema formado por dos electrones en un pozo de potencial infinito en una región unidimensional. Mediante la función de onda propia, $\lambda_n(x)$, de una partícula en un pozo de longitud L se construye una base de funciones $\phi_{ij}(x_1, x_2)$ para el sistema de dos partículas.

$$\lambda_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{C.1})$$

Las funciones de onda $\phi_{ij}(x_1, x_2)$ se obtienen mediante productos de las funciones de onda individuales, creando configuraciones simétricas y antisimétricas.

$$\phi_{ij}(x_1, x_2) = \lambda_i(x_1)\lambda_j(x_2) \quad (\text{C.2})$$

Con una base de tamaño $N = 2$, la base del sistema queda definida por las siguientes funciones.

$$\begin{aligned} \phi_1(x_1, x_2) &= \phi_{11}(x_1, x_2) = \lambda_1(x_1)\lambda_1(x_2) \\ \phi_2(x_1, x_2) &= \phi_{12}^+(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\lambda_1(x_1)\lambda_2(x_2) + \lambda_2(x_1)\lambda_1(x_2)) \\ \phi_3(x_1, x_2) &= \phi_{12}^-(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\lambda_1(x_1)\lambda_2(x_2) - \lambda_2(x_1)\lambda_1(x_2)) \\ \phi_4(x_1, x_2) &= \phi_{22}(x_1, x_2) = \lambda_2(x_1)\lambda_2(x_2) \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

Cada función $\phi_k(x_1, x_2) = \phi_{ij}(x_1, x_2)$ se asocia con un operador de energía cinética \hat{K} , calculado a partir de las derivadas parciales de dichas funciones de onda.

$$\hat{K} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) \quad (\text{C.4})$$

Los elementos de la matriz del Hamiltoniano, $H_{ij} = \langle \phi_i | \hat{H} | \phi_j \rangle$, se obtienen con el operador \hat{K} integrando sobre el espacio, incluyendo el potencial de interacción entre las partículas $\hat{V}_{\text{contacto}}$.

$$\hat{V}_{\text{contacto}} = V_0 \cdot \delta(x_1 - x_2) \quad (\text{C.5})$$

$$\begin{aligned} H_{ij} &= \int_0^L \int_0^L dx_1 dx_2 \left[\phi_i(x_1, x_2) \hat{K} \phi_j(x_1, x_2) + \phi_i(x_1, x_2) \hat{V}_{\text{contacto}} \phi_j(x_1, x_2) \right] \\ &= \int_0^L \int_0^L dx_1 dx_2 \phi_i(x_1, x_2) \hat{K} \phi_j(x_1, x_2) + V_0 \int_0^L dx_1 \phi_i(x_1, x_1) \phi_j(x_1, x_1) \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

Una vez la matriz H_{ij} queda definida, se obtienen sus autovalores mediante la librería *SymPy*, obteniendo así los niveles de energía del sistema.¹

¹https://github.com/juan-gomez-mazorra-uc/TFG/blob/main/results/3_potential_well/potential_well_classic_saturation/potential_well_classic_saturation.py.