Control Cuántico y más

M. Larocca @ TermoAvanzada

Control and quantum chaos @dfuba













Nicolas Mirkin

Martin Larocca

Emiliano Fortes

Tomás Nottenson

DAW



1 Introduccion al Control Cuantico

- 2 Introduccion a Sistemas de Variable Continua
- 3 Introduccion a los Metodos de Krylov



1 Introduccion al Control Cuantico

2 Introduccion a Sistemas de Variable Continua

3 Introduccion a los Metodos de Krylov

1 Escenario de Control Cuantico

El escenario estandar en control cuantico es

$$H(t) = H_0 + \omega(t)H_c \tag{1}$$

la idea subyacente es que uno tiene un sistema con una dada dinamica (dictada por H_0) y uno puede introducir una perturbacion dependiente del tiempo para tratar de dirigir la evolucion. La dinamica de dicho sistema controlado esta determinada por el propagador, solucion de

$$\frac{dU(t)}{dt} = -iH(t)U(t), \quad U(0) = \mathbf{1}$$
(2)

La pregunta es, como elijo $\omega(t)$?

1 Funciones de Costo y Landscapes

Para buscar los protocolos ω que hacen lo que yo quiero, defino una funcion de costo $J[\omega(t)] = f(U[\omega(t)])$. Por ejemplo, digamos que inicialmente tengo el estado $|i\rangle$ y quiero tener, a tiempo T, el estado $|f\rangle$. Defino

$$J[\omega(t)] = 1 - |\langle f| U(T) |i\rangle|^2$$
(3)

y minimizo sobre $\omega(t)$ para encontrar algun ω_{opt} tal que $J[\omega_{opt}] = 0$.

Notar que $J \in [0, 1]$. El mapa J se conoce como 'quantum control landscape' (QCL) y su estructura (topologica, geometrica) determina el exito/fracaso de la busqueda de controles.

1 Parametrizacion

En la practica uno parametriza $\omega(t)$, restringiendo la busqueda en el espacio de funciones (dim infinita) a un espacio de parametros finito. El landscape pasa a ser una 'sabana' en \mathbb{R}^M y el problema de control pasa a ser un problema de optimizacion (en principio altamente no convexo). Una eleccion comun es el llamado piece-wise constant (PWC) ansatz

$$\omega(t) = \begin{cases} \omega_1 & \text{if } 0 < t < \Delta t \\ \vdots & \\ \omega_M & \text{if } (M-1)\Delta t < t < T. \end{cases}$$
(4)

Dicho ansatz es particularmente atractivo porque la solucion de la ecuacion de Schrodinger pasa a factorizarse en un producto de unitarias 'a hamiltoniano constante' (cuya solucion conocemos)

$$U(T) = U_M \cdots U_1, \quad U_j = e^{-iH_j\Delta t}, \quad H_j = H_0 + \omega_j H_c$$
(5)

1 Controlabilidad

Antes de buscar $\omega(t)$, deberiamos preguntarnos si existe. El concepto de controlabilidad encara esta pregunta. El algebra de Lie g genera los elementos del grupo de Lie G a traves de la relacion $G = e^g$. Esta relacion es surjectiva en el caso de G = U(d) o G = SU(d).

El llamado criterio del rango del algebra de Lie establece que un sistema controlado es controlable (es capaz de realizar cualquier evolucion) iff el 'algebra de Lie dinamica' \mathcal{L} (el algebra de Lie generada por iH_0 y iH_c) tiene rango maximo. Equivalentemente $\mathcal{L} = su(d)$. Procedimiento algebraico para generar \mathcal{L} :

- ▶ paso 0: lista los elementos de 'depth' 0, $\{A_0, A_1\}$
- paso k:
 - $\,>\,$ a) calcular conmutadores entre depth k-1 y depth 0, obteniendo elementos depth k
 - b) quedate con los que formen un set li junto con los obtenidos hasta aca
 - > c) termina si ningun nuevo elemento

Si la cantidad de elementos en \mathcal{L} es igual a dimension de su(d), entonces controlable. Entonces existe al menos un $\omega(t)$ para cada elemento $U \in SU(d)$.

1 Estructura topologica del Landscape: trampas and the trap-free statement 19

El lanscape es basicamente la composicion de dos mapas: de controles a unitarias (via Schrodinger) y de unitarias a costo. Una variacion aribitraria del control produce

$$\frac{\delta J}{\delta \omega(t)} = \frac{\partial J}{\partial U} \frac{\delta U}{\delta \omega} \tag{6}$$

el primer mapa se puede mostrar que es convexo. Las trampas tienen que venir de la anulacion del segundo termino, o equivalentemente pedir que dicha matriz no sea full rank. Tiene M filas y D^2 columnas entonces si $M < D^2$ seguro que no lo es! inversamente, uno espera que en el limite $M \rightarrow \infty$ haya D^2 de ellos l.i. en cuyo caso el segundo mapa es surjectivo y la ecuacion solo puede anularse por el primer termino (que solo se anula en optimos globales y saddles).

Nota: system independent analysis

1 Estructura topologica del Landscape: trampas and the trap-free statement

Como mencionamos previamente los problemas de optimizacion correspondientes a problemas de control suelen ser no convexos.



FIG. 1: (Color online) The control landscape of $J_{0\to 1}(a_1, a_2)$ for the LZ system controlled by piecewise constant controls $(N = 2, T = 10, \Delta = 1)$. The landscape possesses multiple traps (local maxima).

Figure: from arXiv:1304.1357

1 Ejemplo: Landau Zener

El problema de Landau-Zener es el siguiente

$$\hat{H}(\omega(t)) = \frac{\Delta}{2}\hat{\sigma}_x + \omega(t)\hat{\sigma}_z \tag{7}$$

A t = 0 tengo estado $|0\rangle$ y quiero buscar $\omega(t)$ tal de, a t = T. haber flipeado el qubit $\psi(T) = |1\rangle$.

Originalmente, LZ proponen una rampa lineal y muestran que si es lo suficientemente lenta (teo. adiabatico) la probabilidad de flip tiende a uno. La pregunta es, puedo flipear mas rapido?

1 Landau Zener: Landscape

Agarro y dibujo los landscapes correspondientes a un ansatz PWC de dos pulsos, para distintos valores de T.



Figure 1. Control landscape for the Hamiltonian of equation (2) with initial state $|0\rangle$ and target state $|1\rangle$. The case depicted here corresponds to the scenario where $N_{\rm ts} = 2$ and so the control field is mapped to a 2D vector (a_1, a_2) . Subplots correspond to different values of the total evolution time: (a) $T/T_{\rm min} = 0.7$, (b) $T/T_{\rm min} = 1.0$, (c) $T/T_{\rm min} = 1.2$ and (d) $T/T_{\rm min} = 10$. The energy gap is set to $\Delta = 1$ in all cases.

Figure: from M. Larocca, P. M. Poggi, and D. A. Wisniacki, **Quantum control landscape for a two-level system near the quantum speed limit**, J. Phys. A: Math. Theor. 51, 385305 (2018)

notamos que $\exists T_*$ tal que $\forall T < T_*$ no hay solucion.

1 Landau Zener: Probabilidad de Trampa

Tambien se puede ver como 'se complica' el landscape a medida que $\mathcal{T} \to \mathcal{T}_*.$



Figure 5. Trapping probability as a function of $N_{\rm b}$ (the number of parameters in the control field), for different values of the total evolution time *T*. A control trajectory is said to be trapped if it converges to a final fidelity below (a) 0.99 and (b) 0.999. Results shown correspond to 500 random seeds, in the region of parameter space where A = 50(see text for more details).

Figure: from M. Larocca, P. M. Poggi, and D. A. Wisniacki, **Quantum control landscape for a two-level system near the quantum speed limit**, J. Phys. A: Math. Theor. 51, 385305 (2018).

1 Estructura Geometrica: Continuos de soluciones



Figure: from M. Larocca, E. Calzetta, and D. A. Wisniacki, **Exploiting** Landscape Geometry to Enhance Quantum Optimal Control, Phys. Rev.A101, 023410 (2020)

1 Hessiano y movimiento por el continuo

Supongamos que arranco con un campo solucion $\vec{\omega_0}$ (vector de parametros optimo). Este cumple que

►
$$J(\vec{\omega}_0) = 0$$

$$\triangleright \nabla J(\vec{\omega_0}) = \vec{0}$$

$$\blacktriangleright \nabla^2 J(\vec{\omega_0}) = QDQ^{-1} \text{ con } D = diag(\lambda_1, \cdots, \lambda_M)$$

exactamente 2D – 2 son no nulos (positivos), el resto cero

Los autovectores asociados a los autovalores cero son las direcciones que 'no salen' del continuo. Entonces, moverme por el continuo es equivalente a encontrar una curva $\vec{\omega}(\zeta)$, parametrizada por ζ , solucion al problema de valores iniciales

$$\frac{d\vec{\omega}(\zeta)}{d\zeta} = f(\vec{\omega}(\zeta)), \quad \vec{\omega}(0) = \vec{\omega_0}$$
(8)

donde $f(\vec{\omega}(\zeta))$ es alguno de los autovectores nulos del Hessiano en $\vec{\omega}(\zeta)$ (o comb. lineal de ellos). Resuelvo integrando numericamente (Euler, RK4, etc).

1 Aplicacion: optimization de un costo secundario

Este esquema me permite post-procesar las soluciones. Defino una segunda funcion de costo $C(\omega)$ y partiendo de una solucion J = 0 integro numericamente la ecuacion anterior con el RHS igual a menos el gradiente de C projectado sobre el null del hessiano.

Ejemplos:

- ▶ suavizado $C_1 = \sum_{i=2}^{M} (\omega_i \omega_{i-1})^2$
- compresion $C_2 = \sum_{k=1}^{L} \sum_{i>j=1}^{K} (\omega_i^k \omega_j^k)^2$
- compresion en frecuencias, analogo a C₂ penalizando las componentes indeseadas de la DFT.

1 Landau Zener: Aprovechando los continuos



features. Each point in the graph depicts the value of the in, component of a given protocal, corresponding to the time interval Δt_{*} . That is, the curves represent distinct protocols, which were coloured relative to their secondary objective cost value. All of them are optimal w.r.t. the main objective in Eq. procedure with C_{∞} . Both process start with the same (dark blue) protocol and achieve remarkably different optimal fields (dark red) depending on which secondary cost was targeted.

Figure 4. Fourier Protocol Compression in the QHO. Each point in the graph depicts the value of the $i_{n,k}$ component of a given protocol, corresponding to the time interval Δt_i . That is, the curves represent distinct protocols, which were coloured relative to their secondary objective cost value of Eq. (12). All of them are optimal with respect to the main objective in Eq. (8). Starting with different random solutions, we present Fourier compression trajectories with (**a**) $p_s = p_c = \{1, 2\}$, and (**b**) $p_s = p_c = \{1\}$.

Figure: from M. Larocca, E. Calzetta, and D. Wisniacki, Fourier compression: A customization method for quantum control protocols, Phys. Rev. A 102, 033108 (2020)



1 Introduccion al Control Cuantico

2 Introduccion a Sistemas de Variable Continua

3 Introduccion a los Metodos de Krylov

2 Introduccion a sistemas de variable continua

Un sistema de variable continua (VC) de N modos bosonicos es descripto por un espacio de Hilbert

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{k=1}^{N} \mathcal{H}_{k} \tag{9}$$

que es el producto tensorial de N espacios de Fock \mathcal{H}_k . En particular uno puede pensar en un sistema de N osciladores (desacoplados)

$$H = \sum_{k} \omega_{k} a^{\dagger} a \tag{10}$$

donde a y a^{\dagger} satisfacen las relaciones de conmutacion bosonicas $[a_k, a_{k'}^{\dagger}] = \delta_{k,k'}$, $[a_k, a_{k'}] = [a_k^{\dagger}, a_{k'}^{\dagger}] = 0$

2 Operadores de cuadratura

Los operadores posicion y momento

$$x = a + a^{\dagger}$$

$$p = -i(a - a^{\dagger})$$
(11)

son usualmente agrupados en el llamado vector de cuadraturas

$$z = (x_1, p_1, \cdots, x_N, p_N)^T$$
(12)

que nos permite escribir de manera compacta las relaciones de conmutacion

$$[z_j, z_k] = 2i\Omega_{jk} \tag{13}$$

donde hemos introducido "la forma simplectica"

$$\Omega = \bigoplus_{k=1}^{N} \omega, \quad \omega = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$
(14)

2 Espacios de Hilbert \mathcal{H} y de Fases Γ

Los estados de un sistema de VC son el set de operadores de traza positiva $\{\rho\}$ en \mathcal{H} . Sin embargo, dichos estados en \mathcal{H} (de dimension infinita) pueden ser descriptos alternativamente tanto por alguna de sus funciones características

$$\chi_{s}(\xi) = \operatorname{Tr}\left[\varrho D_{\xi}\right] e^{s \|\xi\|^{2}/2} \tag{15}$$

donde $\xi \in \mathbb{R}^{2N}$ y $D_{\xi} = e^{z^T \Omega \xi}$, como por alguna de las funciones de quasi-probabilidad (las respectivas transformadas de fourier de las χ_s)

$$W_{s}(\xi) = \frac{1}{\pi^{2}} \int_{\mathbb{R}^{2N}} \chi_{s}(\kappa) \mathrm{e}^{i\kappa^{\top} \Omega \xi} \mathrm{d}^{2N}$$
(16)

2 Espacios de Hilbert \mathcal{H} y de Fases Γ

El siguiente cuadro resume la relacion entre las posibles descripciones

	Hilbert space \mathscr{H}	Phase space Г	
dimension	∞	2 <i>N</i>	(17
structure	\otimes	\oplus	(17
description	Q	χ_s, W_s	

22

2 Estados Gaussianos

Es el set de estados cuyas funciones ξ y χ son gaussianas. En consecuencia, dichos estados estan completamente descritos por los primeros y segundos momentos estadisticos de los operadores de cuadratura

$$\mu = (\langle z_1 \rangle, \langle z_2 \rangle, \cdots, \langle z_{2N} \rangle)$$

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2} \langle z_i z_j + z_j z_i \rangle - \langle z_i \rangle \langle z_j \rangle$$
(18)

los primeros momentos pueden ser arbitrariamente reajustados con operaciones unitarias locales (desplazamientos de Weyl D_{ξ} en cada modo) que dejan invariante las cantidades informacionales relevantes como entropia y entrelazamiento, y por lo tanto suelen ser ignorados. Por lo tanto, a pesar de vivir en espacios de Hilbert de dimension infinita, los estados gaussianos pueden ser completamente descriptos por una matriz de $2N \times 2N$, la matriz de covarianza (MC). Por ejemplo, $W(z) = \frac{e^{-\frac{1}{2}z\sigma^{-1}z^{T}}}{\pi\sqrt{\text{Det }\sigma}}$.

2 Algunas propiedades de la MC y los operadores Simplecticos 124

- Tr{σ} es la energia media y como las entradas de la MC no estan acotadas, la energia tampoco.
- Ia condicion de semi-positividad de ρ se traduce en σ + iΩ ≥ 0 para que una MC sea 'fisica'.

Cuales son las operaciones unitarias que mapean estados gaussianos en estados gaussianos? \rightarrow las generadas por Hamiltonianos como mucho cuadraticos en z. En consecuensia, la llamada representacion metaplectica establece que cualquier unitaria U en \mathcal{H} (que preserve guassianidad) esta asociada con una transformacion simplectica S en Γ tal que preserve la forma simplectica Ω

$$S\Omega S^{T} = \Omega \tag{19}$$

es decir las relaciones de conmutacion.

2 Transformaciones de estados gaussianos

Cualquier transformacion de un estado de VC gaussiano esta asociada con una matriz simplectica

0

$$\sigma \to S\sigma S^T$$
 (20)

	Hilbert space \mathscr{H}	Phase space Γ
dimension	∞	2N
structure	\otimes	\oplus
description	Q	σ
bona fide	$\varrho \ge 0$	$\sigma + i\Omega \ge 0$
operations	$U: U^{\dagger}U = 1$ $\varrho \mapsto U \varrho U^{\dagger}$	$S: S^{T}_{\boldsymbol{\sigma} \mapsto S \boldsymbol{\sigma} S^{T}} \Omega S = \Omega$
spectra	$U\varrho U^{\dagger} = \operatorname{diag}_{0 \le \lambda_k \le 1} \{\lambda_k\}$	$S\sigma S^{T} = \operatorname{diag}_{1 \leq \nu_k < \infty} \{\nu_k\}$
pure states	$\lambda_i = 1, \ \lambda_{j \neq i} = 0$	$\nu_j = 1, \forall j = 1 \dots N$
purity	$\operatorname{Tr} \varrho^2 = \sum_k \lambda_k^2$	$1/\sqrt{\operatorname{Det} \boldsymbol{\sigma}} = \prod_k \nu_k^{-1}$

2.3. Degree of information encoded in a Gaussian state

Figure: from G. Adesso, **Entanglement of gaussian states**, arXiv:quant-ph/0702069

2 El grupo simplectico

El conjuto de transformaciones simplecticas forman el grupo simplectico $Sp(2N, \mathbb{R})$ definido como el set de matrices de $2N \times 2N$ que preserva la forma Ω . Como dicha ecuacion es antisimetrica,

$$(S\Omega S^{T})^{T} = -S\Omega S^{T} \tag{21}$$

impone $\binom{2N}{2}$ condiciones sobre las $(2N)^2$ entradas, dejando N(2N+1) coeficientes reales libres. Por ejemplo, si N = 1 el grupo tiene dimension d = 3 y puede mostrarse que Sp(1) es isomorfo a SU(2). Se puede ver que

$$T_1 = x^2 \quad T_2 = p^2, \quad T_3 = xp + px$$
 (22)

cumplen $[T_i, T_j] = 2i\epsilon_{ijk}T_k$ y por lo tanto generan el grupo.

2 Evolucion temporal y control en VC

La dinamica en \mathcal{H} esta dada por el propagador U(t) solucion de

$$\frac{dU(t)}{dt} = -i\hat{H}(t)U(t), \quad U(0) = \mathbf{1}$$
(23)

La transformacion simplectica asociada es solucion de

$$\frac{dS(t)}{dt} = JH(t)S(t), \quad S(0) = \mathbf{1}$$
(24)

donde $\hat{H} = \sum_{ij} H_{ij} \hat{z}_i \hat{z}_j$. En definitiva,

$$\hat{z}_{\alpha}(0) \rightarrow U^{\dagger}(t)\hat{z}_{\alpha}(0)U(t) = \sum_{\beta} S_{\alpha\beta}(t)\hat{z}_{\beta}(0)$$
 (25)

o bien

$$z(t) = S(t)z(0) \tag{26}$$

2 Ejemplo: el oscilador parametrico

Supongamos una particula en una trampa armonica cuya frecuencia puede ser manipulada

$$H(t) = H_0 + g(t)H_c, \quad H_0 = p^2/2, \quad H_c = x^2/2, \quad g(t) = \omega^2(t)$$
 (27)

como vimos previamente, los operadores H_0 y H_c generan un tercer elemento l.i. y por lo tanto todo Sp(1). Es decir podemos targetear cualquier transformacion $S_{target} \in Sp(1)$.

Por ejemplo, en el caso de un ciclo de Otto cuantico, suele ser deseable realizar expansiones/compresiones adiabaticas que no generen extiaciones en el sistema. En general, puede vincularse el valor medio de las excitaciones a tiempo T con el inicial a traves

$$N(T) = \left\langle \hat{a}^{\dagger}(T)\hat{a}(T) \right\rangle = N(0)(1+2|\beta|^2) + |\beta|^2$$
(28)

2 Ejemplo: el oscilador parametrico

Esto es identico a buscar un $\omega(t)$ que cumpla $\omega(0) = \omega_0$, $\omega(T) = \omega_f$ y $S_{targ} = {f 1}$ ya que

$$z(T) = \begin{pmatrix} x(T) \\ p(T) \end{pmatrix} = S(T)z(0)$$
(29)

y por lo tanto a(T) = a(0) (en cuyo caso N(T) = N(0)).

Lo bueno es que si bien en el caso de un oscilador, puedo resolver facilmente las ecuaciones de movimiento

$$\ddot{f}(t) + \omega^2(t)f(t) = 0, \quad f(0) = \frac{1}{\sqrt{2\omega_0}}, \quad \dot{f}(0) = -i\sqrt{\frac{\omega_0}{2}}$$
(30)

y calcular β

$$\beta = -\frac{i}{\sqrt{2\omega_T}} [\dot{f}(T) + i\omega_T f(T)]$$
(31)

esto no es cierto en el caso general.

2 el oscilador parametrico

En cambio, proponiendo un control PWC

$$S(T) = S_M \dots S_1, \quad S_j = e^{JH_j\Delta t}, \quad H_j = H_0 + \omega_j^2 H_c$$
(32)

tengo un esquema numerico simple para hayar controles que implementen cualquier transformacion gaussiana sobre cualquier numero de modos acoplados linealmente.

Mi nuevo problema pasa a ser la exponenciacion de matrices grandes...

3 Outline

1 Introduccion al Control Cuantico

2 Introduccion a Sistemas de Variable Continua

3 Introduccion a los Metodos de Krylov

3 Alexey Krylov: 1863-1945

ruso

- como toda persona de bien de aquella epoca, hizo ochocientas mil cosas incluyendo
 - > diseño de barcos y artilleria
 - > matematica, astronomia
 - primera traduccion al ruso del Philosophiæ Naturalis Principia Mathematica de Newton
 - primero en calcular y explicar el aumento de la resistencia hydrodinamica en aguas poco profundas
 - > padre de los solitones
 - primera maquina Rusa para integrar ecuaciones diferenciales



3 Metodos de Krylov: el problema

Tengo matriz A y vector v y quiero calcular w = f(A)v. El camino estandar es aplicar el teorema espectral

$$f(A) = \sum_{i} f(\lambda_{i}) |\lambda_{i}\rangle \langle \lambda_{i}|$$
(33)

donde $\{\lambda_i, |\lambda_i\rangle\}$ son los autovalores y autovectores de A. Esto es exactamente lo que uno hace para calcular los propagadores de un campo PWC que vimos anteriomente, usando $f(x) = e^x$.

El problema surge cuando uno tiene matrices grandes. El costo de la diagonalizacion de matrices es $O(d^3)$ tanto en iteraciones como en memoria. Por este motivo, la evolucion temporal rapidamente se vuelve el cuello de botella en control cuantico (mucho antes que la representacion eficiente de estados).

Para esto ultimo se usan tensor networks, pero uno tiene que asumir poco entrelazamiento. Para nada es el caso en lo que sigue.

3 Evolucion Temporal y los Subespacios de Krylov

Consideremos la evolucion temporal de un estado $|\psi\rangle$, de dimension D, sujeto a un Hamiltoniano H

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi\rangle = (\mathbf{1} + (-iHt) + \frac{(-iHt)^2}{2} + \dots) |\psi\rangle$$
(34)

supongamos que trunco la serie en el elemento $N \ll D$.

Obtengo un estado
$$|\psi(t)\rangle_N^{Tay}$$
 que vive en el span $\{|\psi\rangle, H |\psi\rangle, \dots, H^{N-1} |\psi\rangle\} \equiv \mathcal{K}_N.$

Sin embargo, este no es el estado $\in \mathcal{K}_N$ que minimiza la distancia a $|\psi(t)\rangle$!

3 Approximacion de Krylov

Los metodos de Krylov proveen una manera simple, algoritmica, de hallar el estado $\in \mathcal{K}_N$ que minimiza la distancia al exacto $|\psi(t)\rangle$. Lo primero que hay que hacer es hallar una base ortonormal de \mathcal{K}_N . Esencialmente se implementa Gram-Schmidt, pero surgen pequeñas diferencias que dan lugar a distintos algoritmos. Por ejemplo, el metodo de Lanczos asume H hermitico y por lo tanto puede limitarse a ortogonalizar cada nuevo vector solo respecto a los ultimos dos elementos de la base.

> **Algorithm2** Lanczos Algorithm. Receives a Hamiltonian H and a state $|\psi\rangle$ and returns a set of N orthonormal vectors $\{|v_i\rangle\}$, the Krylov basis.

 $\begin{array}{ll} 1: & |v_0\rangle \leftarrow |\psi\rangle \\ 2: & \text{for } j > 0 \text{ do} \\ 3: & |x_j\rangle \leftarrow H \, |v_{j-1}\rangle \\ 4: & |\omega_j\rangle = |x_j\rangle - \sum_{k=j-2}^{j-1} \langle v_k | x_j \rangle \, |v_k\rangle \\ 5: & b_j = \sqrt{\langle \omega_j | \omega_j \rangle} \\ 6: & \text{ if } b_j > 0 \text{ then} \\ 7: & |v_j\rangle \leftarrow \frac{1}{b_j} | \omega_j \rangle. \end{array}$

3 Metodo de Lanczos

Consideremos el proyector sobre dicha base ortonormal de \mathcal{K}_N , B_N

$$P_N = \sum_{j=0}^{N-1} |v_j\rangle \langle v_j| = V_N^{\dagger} V_N$$
(35)

donde V_N^{\dagger} es la matriz de cambio de base (D, N) entre el espacio reducido, *N*-dimensional, y el original

$$V_{N}^{\dagger} = \begin{bmatrix} \vdots & \vdots & \vdots \\ |v_{0}\rangle, & |v_{1}\rangle, & , |v_{N-1}\rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix}$$
(36)

3 Metodo de Lanczos

Como dijimos, la idea es encontrar el elemento $|\psi_N(t+\Delta t)
angle\in B_N$ mas cercano a $|\psi(t)
angle$

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &\approx P_{N}e^{-iHt}P_{N}|\psi\rangle \\ &= V_{N}^{\dagger}e^{-iT_{N}t}V_{N}|\psi\rangle \equiv |\psi_{N}(t)\rangle \end{aligned} \tag{37}$$

donde $T_N = V_N H V_N^{\dagger}$ es el Hamiltoniano en la base de Krylov. Por construccion, V_N mapea el estado inicial al ground state de este nuevo sistema efectivo *N*-dimensional

$$|V_N|\psi(t)\rangle = (1, 0, \cdots, 0)^T \equiv |0_N\rangle$$
 (38)

luego el ground evoluciona sujeto a T_N y finalmente es mapeado de vuelta al espacio original.

El truco es que $U_N(t) = P_N e^{-iHt} P_N$ no es para nada una buena approximacion a U(t), pero $U_N(t) |\psi\rangle$ si de $|\psi(t)\rangle$. $U_N(t)$ es especialista en propagar $|\psi\rangle$ bajo H (por construccion).

3 Esquema



3 Ejemplo: cadena XXZ controlada

Tengo cadena de L particulas de spin 1/2 con interacciones spin-spin 'Heisenberg' a primeros vecinos

$$H_{d} = \frac{J}{2} \sum_{i=1}^{L-1} \sigma_{i}^{x} \sigma_{i+1}^{x} + \sigma_{i}^{y} \sigma_{i+1}^{y} + \alpha_{z} \sigma_{i}^{z} \sigma_{i+1}^{z}.$$
 (39)

 H_d conserva la magnetizacion total $\sigma_z = \sum_{i=1}^{L} \sigma_i^z$. Esto implica que el espacio de estados se fractura en L+1 subespacios de K excitaciones

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{K=0}^{L} \mathcal{S}_{K} \tag{40}$$

con dimension

$$D_{K} = \binom{L}{K} = \frac{L!}{K!(L-K)!}.$$
(41)

3 Ejemplo: cadena XXZ controlada

Como los acoplamientos son homogeneos, tambien $[H,\Pi] = 0$, donde

$$\Pi \left| \downarrow \downarrow \uparrow \downarrow \right\rangle = \left| \downarrow \uparrow \downarrow \downarrow \right\rangle. \tag{42}$$

cada subespacio de K exitaciones se rompe en dos $S_{k,\pm}$.

Para controlar la dinamica introducimos un campo magnetico local en el primer y el ultimo spin

$$H_c = \frac{J}{2}(\sigma_1^z + \sigma_L^z) \tag{43}$$

notar que el campo actua en z y por lo tanto tambien conserva S_z y Π .

3 Sistema reducido

Como H(t) conmuta con $S_z \neq \Pi \forall t \neq \forall \omega(t)$, la evolucion de un estado inicial que es autoestado de $S_z \neq \Pi$ esta circunscripta al correspondiente subespacio $S_{k,\pm} \subset \mathcal{H}$. Por lo tanto, a todo fin practico, podemos trabajar con vectores y matrices efectivas de dimension $D_{K,\pm} \ll 2^L$.

En general, dada una simetria S, la escribo en mi base, la diagonalizo y luego uso los autovectores correspondientes al autovalor deseado para construir una matriz rectangular Q. Finalmente

$$ilde{H} = QHQ^{\dagger}, \quad \left| ilde{\psi} \right\rangle = Q \left| \psi
ight
angle \tag{44}$$

Incluso puedo chequear la controlabilidad dentro del subespacio haciendo el test con los generadores reducidos \tilde{H}_d y \tilde{H}_c .

3 Krylov en accion



Figure 2. Algorithm benchmarking: (a) optimization run-time R and (b) elementary run-time R (run-time per iteration per time-step) for the state transfer task in Eq. (11) using GRAPE (dotted line and red squares) and K-GRAPE (dashed line and green squares) as a function of D, the dimension of the subspace holding the dynamics. The data points corresponding to GRAPE and K-GRAPE are fitted with linear and a cubic functions, respectively. In a first low-dimensional regime GRAPE outperforms (see inset), while in the large-dimensional one, K-GRAPE does.

Figure: from M. Larocca and D. Wisniacki, K-GRAPE: A Krylov Subspace approach for the efficient control of quantum many-body dynamics, arXiv:2010.03598 (2020)

3 Extension a operadores

En realidad, el metodo no esta limitado a propagacion de estados. Un operador O tambien es un vector en algun espacio vectorial (por ejemplo SU(d)). Por lo tanto, la evolucion temporal de un sistema de dim finita

$$O(t) = U(t)OU^{\dagger}(t) \tag{45}$$

tambien puede ser aproximada con Krylov notando que el operador de un operador es un superoperador

$$O(t) = e^{-iLt}O \tag{46}$$

donde LO = [H, O]. Lo unico que me falta es definir un producto interno

$$(A,B) = \frac{1}{D} \operatorname{Tr} \{ A^{\dagger} B \}$$
(47)

3 Evolucion eficiente de estados gaussianos

Veamos que tambien nos sirve para propagar eficientemente estados gaussianos. Como comentamos anteriormente, la matriz de covarianza evoluciona segun

$$\sigma(t) = S(t)\sigma S^{T}(t) = S_{M} \cdots S_{1}\sigma S_{1}^{T} \cdots S_{M}^{T}$$
(48)

donde usamos un ansatz PWC. El tema es que cada S_j es una exponencial que puede ser impracticable. Sin embargo, Krylov viene al rescate. Defino el liouvilliano como

$$L\sigma = JH\sigma + \sigma HJ^T \tag{49}$$

y el producto interno

$$(A,B) = \frac{1}{D} \operatorname{Tr} \{ A^{\mathsf{T}} B \}$$
(50)

notemos que Krylov NO sirve para targetear simplecticas/unitarias.

