

El caos cuántico como mecanismo para la proliferación de errores de Trotter

Presentado por

Gastón Federico Scialchi

Dirección por

Dr. Diego Ariel Wisniacki

y codirección por

Dr. Augusto José Roncaglia

Para optar por el título de

Licenciado en Ciencias Físicas

de la

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

El día 27 de marzo de 2023

TEMA: El caos cuántico como mecanismo para
la proliferación de errores de Trotter
ALUMNO: Gastón Federico Scialchi
L.U.N°: 792/17
LUGAR DE TRABAJO: Departamento de Física, FCEN, UBA
DIRECTOR DEL TRABAJO: Dr. Diego Ariel Wisniacki
CODIRECTOR: Dr. Augusto José Roncaglia
FECHA DE INICIACIÓN: Julio de 2022
FECHA DE FINALIZACIÓN: Marzo de 2023
FECHA DE EXAMEN: Marzo de 2023
INFORME FINAL APROBADO POR:

Gastón F. Scialchi
(Autor)

Dr. Fernando C. Lombardo
(Jurado)

Dr. Diego A. Wisniacki
(Director)

Dr. Pablo M. Poggi
(Jurado)

Dr. Augusto J. Roncaglia
(Codirector)

Dr. Pablo I. Tamborenea
(Jurado)

Prof. de Tesis de Licenciatura

A mis viejos, mis hermanos y mis abuelos. A mis primos y tíos, y en general a toda mi familia. A mi mejor amiga, y tanto a los muchachos de Baradero como a los que tuve la suerte de conocer a lo largo de este trayecto. A Leo, a Dani y sus respectivas familias, en varias maneras extensiones de la mía.

A cada docente con el que he cursado, y haya mantenido viva la chispa de curiosidad. A mis directores, y cada integrante del grupo. A la Universidad de Buenos Aires, la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, y el Departamento de Física.

A todas las personas que mi memoria falla en mencionar este lunes por la madrugada.

Muchas gracias.

RESUMEN

En esta tesis estudiamos la fidelidad de la dinámica trotterizada de varios modelos de espines y su relación con la caoticidad del sistema efectivo subyacente. La trotterización es un método de simulación cuántica digital que consiste en descomponer la evolución temporal del sistema a simular en pasos discretos (pasos de Trotter) y expandir el operador de evolución como una secuencia de compuertas primitivas basadas en las fórmulas de Trotter-Suzuki.

Trabajos recientes mostraron la existencia de un umbral (un *threshold*) en la fidelidad del método en función del paso de Trotter donde los errores proliferan rápidamente, y la dinámica digitalizada del sistema se vuelve caótica cuántica.

Nuestros resultados indican que no hay una relación intrínseca entre la proliferación de errores del método y el desarrollo de caos cuántico en la dinámica trotterizada. Encontramos sistemas integrables que no transicionan a caos en función del paso de Trotter, como sistemas ya caóticos, y en ambos casos los errores proliferan. Hallamos que el *threshold*, como característica de la dinámica trotterizada, es ampliamente dependiente del estado inicial considerado, y en general la transición es suave. También observamos la existencia de "islas de estabilidad", donde la dinámica es regular y los errores decrecen incluso para valores grandes del paso de Trotter, y las relacionamos con fases de cristal temporal de Floquet para un sistema forzado periódicamente. Sin embargo, observamos que para un estado inicial arbitrario no se puede esperar una reducción significativa de los errores.

ÍNDICE GENERAL

1	INTRODUCCIÓN	1
2	MARCO TEÓRICO	5
2.1	Teoría de Trotter-Suzuki	5
2.2	Teorema de Floquet y expansión de Magnus	6
2.3	Cristales temporales de Floquet	8
2.4	Trotterización y caos cuántico	10
2.4.1	Deslocalización y proliferación de errores	11
2.4.2	Caos en la trotterización del modelo de Ising A2A	12
2.4.3	El kicked top y caos cuántico	16
3	RESULTADOS	19
3.1	Modelo de Ising con campo magnético	19
3.2	Dependencia con el estado inicial	30
3.3	Modelo de Heisenberg con anisotropía	35
3.4	Islas de estabilidad	40
3.4.1	Islas de la trotterización iz-x	41
3.4.2	Islas de la trotterización i-zx	44
3.4.3	Islas de la trotterización ix-z	46
4	CONCLUSIONES	49
	APÉNDICES	53
A	MEDIDAS DINÁMICAS	55
B	MEDIDAS ESPECTRALES DE CAOS CUÁNTICO	57
B.1	Estadística de autovalores	58
B.2	Estadística de autovectores	59
C	RESULTADOS ADICIONALES	63
C.1	Trotterizaciones iz-x e ix-z	63

C.2 Dependencia con el estado inicial: ix-z 66

1 INTRODUCCIÓN

La computación cuántica trae consigo la promesa de resolver ciertos problemas computacionales exponencialmente más rápido de lo que se puede lograr con una computadora clásica [1]. Una de sus principales aplicaciones es la simulación de la dinámica de sistemas cuánticos de muchos cuerpos [2] que resultan demasiado demandantes para una computadora clásica. Para encarar estos problemas se utilizan principalmente dos tipos de computadoras cuánticas: computadoras analógicas, las cuales son especialmente construidas y controladas para generar una dinámica que emule las propiedades del sistema de muchos cuerpos que se quiere estudiar; y computadoras cuánticas digitales, donde la dinámica deseada se construye en un número de pasos discretos a partir de una secuencia de interacciones primitivas accesibles experimentalmente, llamadas compuertas. Éstas últimas son flexibles, y ofrecen la posibilidad de programación universal [3]. Los dispositivos disponibles en la actualidad son caracterizados por su tamaño intermedio (de ~ 100 qubits) y la falta de corrección de errores robusta (dispositivos NISQ, por sus siglas en inglés).

Uno de los métodos utilizados para implementar simulaciones cuánticas digitales bajo la arquitectura de compuertas es conocido como trotterización [3, 4], que consiste en la discretización de la evolución temporal en pasos finitos (pasos de Trotter) y en la aproximación del operador de evolución del sistema que se desea simular como una serie de compuertas primitivas determinadas por las fórmulas de Trotter-Suzuki [5–9].

Trabajos recientes [10–12] presentaron la existencia de un valor umbral (un *threshold*) en función del paso de Trotter a partir del cual el método de trotterización pierde validez rápidamente, y la dinámica digitalizada muestra señales de caos cuántico. A lo largo de éstos trabajos, se desarrolla la idea de que el mecanismo de fondo para la proliferación de errores en el algoritmo (errores de Trotter) es el desarrollo de caos cuántico en el sistema efectivo que realiza dicha dinámica. Esta interpretación recibe su apoyo en una equivalencia entre la dinámica que realiza un sistema trotterizado y aquella proveniente de un sistema forzado periódicamente, utilizando como ejemplo la generación de caos cuántico en el kicked top [11, 13].

Sin embargo, la interpretación anterior deja de lado algunas consideraciones: La primera es que las transiciones al caos son suaves en función del parámetro de caos, y por lo tanto la existencia de un threshold resulta particular. En segundo lugar, los sistemas estudiados para los cuales se correlacionó robustamente el caos cuántico con la proliferación de errores de Trotter son integrables, por lo que queda por investigar qué sucede en la trotterización de un sistema que ya es caótico. Frente a las observaciones anteriores es natural adicionar la cuestión de si existen sistemas donde los errores proliferen sin una transición al caos. Por último, en Ref. [12] se remarca la *universalidad* en el comportamiento observado en los sistemas que se estudiaron.

La motivación principal de esta tesis es indagar en las cuatro cuestiones que acabamos de mencionar. Para hacerlo, realizamos simulaciones de la dinámica trotterizada de varios modelos, analizando varios aspectos de la dinámica, y con distintos esquemas de trotterización. A su vez, analizamos las propiedades espectrales de la unitaria trotterizada para cuantificar el caos del sistema en función del paso de Trotter. Exploramos un modelo de Ising con campo magnético transverso-longitudinal, el cual posee una transición al caos paramétrica, de forma tal de estudiar la proliferación de errores en un modelo que ya es caótico. También aplicamos el análisis anterior a un modelo de Heisenberg, el cual posee una trotterización que preserva la integrabilidad del sistema. Luego estudiamos la robustez de los resultados anteriormente obtenidos ante distintas elecciones del estado inicial con el que se desarrolla la dinámica. Como parte de estos resultados observamos la existencia de "islas de estabilidad", que son regiones en función del paso de Trotter para las cuales la dinámica se vuelve regular incluso más allá de la región en donde proliferan los errores, y éstos se reducen significativamente. Este fue un aspecto más de la dinámica trotterizada que estudiamos.

Nuestros resultados indican que no existe una correlación estricta entre la proliferación de errores de Trotter y la generación de caos cuántico en la dinámica trotterizada, y que tampoco ésta última es una característica robusta de sistemas trotterizados. Encontramos sistemas integrables que no sufren una transición al caos en función del paso de Trotter pero que sus errores se vuelven no controlados, y sistemas ya caóticos (y que por lo tanto tampoco sufren una transición al caos) donde también los errores proliferan. Por otro lado, obtuvimos que el threshold, como una característica de la dinámica trotterizada, es ampliamente dependiente del estado inicial considerado, y que para uno arbitrario la transición es suave. Si bien existen algunos aspectos básicos de la dinámica trotterizada que parecen pre-

sentarse en todos los sistemas y trotterizaciones estudiadas, encontramos que hay otros en los cuales existen una gran variedad de comportamientos, entre los cuales se encuentran los resultados ya mencionados. Por último, encontramos que las islas de estabilidad están relacionadas con fases de cristal temporal de Floquet para un sistema forzado periódicamente, y que en general no serán una herramienta útil para mejorar el rendimiento del algoritmo para valores grandes del paso de Trotter.

La tesis se encuentra organizada como detallamos a continuación. El capítulo 2 sienta la base conceptual y teórica sobre la que se apoya esta tesis, sus resultados y sus conclusiones. Empezaremos definiendo la expansión de Trotter-Suzuki en la sección 2.1, y luego en la sección 2.2 daremos una introducción a la teoría de Floquet y la expansión de Magnus, la cual nos ofrece una forma alternativa de interpretar los errores de Trotter. En la sección 2.3 definiremos la noción de cristal temporal de Floquet, que nos permitirá caracterizar el comportamiento de los sistemas trotterizados sobre las islas de estabilidad mencionadas. La última sección de este capítulo es la sección 2.4, en la cual resumimos los resultados sobre los que se basa esta tesis, y plantearemos las cuestiones principales que la motivan. En el capítulo 3 presentamos los resultados principales de la tesis. En la sección 3.1 estudiamos la dinámica trotterizada mediante varios indicadores y medidas de error, y las propiedades espectrales de la unitaria trotterizada en función del paso de Trotter, para los regímenes integrables y caóticos de un modelo que posee una transición integrabilidad-caos paramétrica. En la sección 3.2 estudiaremos la robustez de los resultados obtenidos anteriormente en función del estado inicial elegido para realizar las simulaciones. Luego, en la sección 3.3 realizamos el mismo análisis para un modelo que posee una trotterización construida de forma tal que preserve la integrabilidad del sistema. La sección 3.4 es la última del capítulo de resultados, y en ella estudiaremos particularmente las regiones en función del paso de Trotter (y para valores grandes) donde la dinámica se vuelve regular. Finalmente, el capítulo 4 posee un resumen de los resultados obtenidos y sus interpretaciones. Allí presentaremos las conclusiones de la tesis y las posibles direcciones en las cuales se podría dirigir la investigación a futuro. La tesis posee varios apéndices. El apéndice A define todas las cantidades que utilizamos para caracterizar la dinámica de cada sistema estudiado. Por otro lado, el apéndice B contiene un resumen de la teoría de matrices aleatorias y su relación con el caos cuántico, y cómo las utilizamos. Por último, el apéndice C muestra resultados que sirven como apoyo y contextualizan aquellos mostrados en el cuerpo principal de la tesis, pero que en sí mismos no aportan nada significativamente nuevo a las conclusiones obtenidas.

2 MARCO TEÓRICO

En este capítulo daremos una breve introducción a las ideas y conceptos que componen la base teórica sobre la que se basa esta tesis, sus resultados y conclusiones. Empezaremos en la sección 2.1, donde definiremos la expansión de Trotter-Suzuki, cuya teoría sienta las bases matemáticas del método para realizar simulaciones cuánticas digitales que llamamos "trotterización". En la sección 2.2 introduciremos algunos resultados básicos de la teoría de Floquet y la expansión de Magnus, lo cual nos permitirá reinterpretar la expansión de Trotter-Suzuki como un operador de Floquet para un sistema forzado periódicamente. La sección 2.3 define la noción de cristal temporal en mecánica cuántica, que resultará útil para interpretar algunos de los resultados que veremos posteriormente. Por último, en la sección 2.4 repasamos los resultados previos sobre los que se basa esta tesis, a la vez que exponemos la relación entre el método de trotterización y el caos cuántico. Luego daremos un resumen sobre la construcción de la idea de que el mecanismo de fondo para la proliferación de errores de Trotter es el caos cuántico generado por la expansión de Trotter-Suzuki, discutiremos las formas en las cuales tal interpretación resulta insatisfactoria, y plantearemos las preguntas cuya respuesta es la motivación principal de esta tesis.

2.1 TEORÍA DE TROTTER-SUZUKI

La trotterización es un método que permite implementar simulaciones cuánticas en una arquitectura basada en compuertas primitivas, y consiste en la aproximación de la evolución temporal de un sistema discretizándola en pasos temporales finitos (pasos de Trotter). El método se basa en los resultados de Trotter [5], que fueron luego expandidos por Suzuki como una teoría para construir aproximantes de exponenciales de operadores [6–9]. En este esquema [3] se descompone el hamiltoniano del sistema que se desea simular como una suma de hamiltonianos locales individuales $H = \sum_{k=1}^L H_k$ y luego, al discretizar la evolución temporal en n pa-

sof finitos, las fórmulas de Trotter-Suzuki nos permiten aproximar el operador de evolución completo como

$$U(t) = e^{-itH} \approx \left(e^{-i\frac{t}{n}H_1} \dots e^{-i\frac{t}{n}H_L} \right)^n \quad (2.1)$$

donde $\tau = t/n$ es lo que llamamos el paso de Trotter. Ésta representa una descomposición de primer orden en el número de pasos n , escalando como n^{-1} , pero también existen descomposiciones de orden mayor. Se han encontrado cotas generales para el error al utilizar expansiones de este tipo para valores de n finito [4]. En particular, para el caso de dos sumandos $H = H_1 + H_2$ se obtiene la cota para el error en la unitaria

$$\left\| U(t) - \left(e^{-i\frac{t}{n}H_1} e^{-i\frac{t}{n}H_2} \right)^n \right\| \leq \frac{t^2}{2n} \|[H_1, H_2]\| \quad (2.2)$$

donde $\|\cdot\|$ es la norma espectral.

2.2 TEOREMA DE FLOQUET Y EXPANSIÓN DE MAGNUS

Como veremos a continuación, la expansión de Trotter-Suzuki (2.1) se puede relacionar con la dinámica de un sistema forzado periódicamente, con período dado por el paso de Trotter, lo cual nos permitirá obtener una formulación alternativa para los errores (2.2) que se presta más inmediatamente a interpretaciones físicas. Para llegar a ello, daremos un breve resumen de la teoría de Floquet y la consiguiente expansión de Magnus.

El teorema de Floquet [14] nos permite escribir la evolución correspondiente a un hamiltoniano con dependencia periódica τ en el tiempo $H(t) = H(t + \tau)$ como

$$U(t) = P(t)e^{-itH_F} \quad (2.3)$$

donde P es un operador unitario y periódico $P(t) = P(t + \tau)$, y el segundo término representa la evolución temporal con respecto a un hamiltoniano independiente del tiempo llamado hamiltoniano de Floquet. Notemos que $P(n\tau) = \mathbb{1}$, y por lo tanto a tiempos $t = n\tau$ tenemos que la dinámica estroboscópica es efectivamente generada por el hamiltoniano estático de Floquet $U(t = n\tau) = e^{-itH_F}$, y es ésta unitaria a la que típicamente se le llama operador de Floquet.

El resultado anterior nos permite describir la dinámica del sistema a tiempos estroboscópicos de forma efectiva mediante un hamiltoniano independiente del

tiempo. En general, obtener una expresión cerrada para H_F no es posible, y se recurre a expansiones en frecuencia. Una de ellas es la expansión de Magnus [14,15], que es un desarrollo perturbativo en el período τ a partir de escribir el operador de Floquet como un producto ordenado temporalmente $U(\tau) = \mathcal{T} e^{-i \int_0^\tau dt H(t)}$ e invertir la relación

$$e^{-i\tau H_F} = \mathcal{T} e^{-i \int_0^\tau dt H(t)} \quad (2.4)$$

obteniendo

$$H_F = H_0 + \frac{\tau}{2\pi} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l} ([H_l, H_{-l}] - [H_l, H_0] + [H_{-l}, H_0]) + \mathcal{O}(\tau^2) \quad (2.5)$$

donde H_l son las componentes de Fourier $H(t) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} H_l e^{i \frac{2\pi l}{\tau} t}$. Ésta es una expansión en frecuencias altas, y su convergencia está relacionada con la capacidad del sistema de absorber energía a una dada frecuencia del forzado que da a lugar la dependencia temporal periódica. Que la serie de Magnus converja quiere decir que el hamiltoniano de Floquet es un operador local y la evolución del sistema está gobernada por un hamiltoniano local y estático, de forma tal que la energía del sistema se conserva [14,16].

Como adelantamos al inicio de la sección, existe una conexión entre sistemas trotterizados y sistemas forzados periódicamente, que explayamos a continuación. Consideremos un hamiltoniano delta-forzado con periodo τ de la siguiente forma:

$$H(t) = H_1 + \lambda H_2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - n\tau) \quad (2.6)$$

donde H_1 y H_2 no dependen del tiempo. La evolución estroboscópica del sistema, desde un tiempo ϵ antes de un pulso hasta un tiempo ϵ antes del siguiente, está dada por el operador de Floquet

$$U(\tau - \epsilon, -\epsilon) = U(\tau - \epsilon, \epsilon)U(\epsilon, -\epsilon) = e^{-i \int_\epsilon^{\tau-\epsilon} dt' H(t')} e^{-i \int_{-\epsilon}^\epsilon dt' H(t')} \quad (2.7)$$

La primera integral resulta $(\tau - 2\epsilon)H_1$ y la segunda $2\epsilon H_1 + \lambda H_2$, por lo que tomando el límite $\epsilon \rightarrow 0$ encontramos que el operador de Floquet para este sistema es

$$U(\tau) = e^{-i\tau H_1} e^{-i\lambda H_2} \quad (2.8)$$

En efecto, identificando $\lambda \equiv \tau$ como el paso de Trotter, llegamos a que cualquier hamiltoniano independiente del tiempo $H = H_1 + H_2$, al ser trotterizado a primer

orden según (2.1), describirá una dinámica proveniente de un sistema delta-forzado periódicamente con período e intensidad dadas por τ .

Este resultado nos permite interpretar la evolución trotterizada del hamiltoniano independiente del tiempo H como la dinámica estroboscópica de un sistema dependiente del tiempo dado por (2.6) bajo algún hamiltoniano de Floquet H_F , de forma tal que la unitaria trotterizada para la evolución en un paso de Trotter cumple $U(\tau) = e^{-i\tau H} \approx e^{-i\tau H_1} e^{-i\tau H_2} = e^{-i\tau H_F}$. Luego, como el sistema H que se desea simular mediante trotterización y el hamiltoniano de Floquet H_F son independientes del tiempo, podemos cuantificar los errores de Trotter de forma alternativa a (2.2), y a nivel del hamiltoniano, mediante la expansión de Magnus (2.5). Aplicando dicha expansión a la unitaria trotterizada dada por (2.1) se obtiene

$$H_F - H = -i\frac{\tau}{2} \sum_{j < k} [H_j, H_k] + \mathcal{O}(\tau^2) \quad (2.9)$$

En Refs. [10, 11] estudian los errores en cantidades dinámicas, como valores de expectación, y encontraron que para valores pequeños del paso de Trotter, dichos errores concuerdan con los predichos por una expansión perturbativa basada en la expansión de Magnus (2.9).

2.3 CRISTALES TEMPORALES DE FLOQUET

En esta sección definiremos y daremos una breve introducción a la noción de cristal temporal en sistemas cuánticos forzados periódicamente, que podemos tratar mediante el formalismo de Floquet ya visto. Luego vamos a dar un ejemplo que resultará útil en la interpretación de algunos de los resultados de esta tesis.

Un cristal temporal de Floquet es un estado de la materia en el cual la dinámica de algún observable rompe con la simetría de traslación temporal discreta del hamiltoniano forzado periódicamente $H(t) = H(t + \tau)$ que modela el sistema, en analogía con un cristal ordinario donde se rompe la simetría de traslación espacial [17–19].

Existen varias formas de definir una fase de cristal temporal, basadas en la respuesta del sistema ante el forzado, o la longitud de correlación de operadores locales en un conjunto de los autoestados del operador de Floquet [18, 19]. En general, una fase de cristal temporal puede ser definida [20] mediante un conjunto de estados iniciales $\{|\psi\rangle\}$ y la existencia de algún observable O , tal que los valores

de expectación en la dinámica estroboscópica $t = n\tau$ del observable en el límite termodinámico

$$f(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \psi(t) | O | \psi(t) \rangle \quad (2.10)$$

cumplan las siguientes tres condiciones:

- (i) Ruptura de la simetría de traslación temporal: $f(t) \neq f(t + \tau)$, a pesar de que $H(t) = H(t + \tau)$.
- (ii) Rigidez: $f(t)$ tiene un período de oscilación fijo sin necesidad de un conjunto particular de parámetros del hamiltoniano.
- (iii) Persistencia: las oscilaciones de $f(t)$ sobreviven por un tiempo infinitamente largo.

Estas condiciones definen un criterio por el cual se pueden distinguir las oscilaciones debidas a una fase de cristal temporal de otros fenómenos oscilatorios típicos en sistemas cuánticos, como oscilaciones de Rabi, o de Bloch [20].

Una fase de cristal temporal tiene consecuencias en el espectro del operador de Floquet $U(\tau)$: sus autoestados se convierten en estados de tipo gato y las fases asociadas conforman grupos en el círculo unitario separados entre sí en un ángulo $2\pi/k$, siendo k el número de estados que componen la superposición [18, 19]. Como consecuencia, el espectro de $U^k(\tau)$ está compuesto por grupos de fases en el círculo unitario degeneradas k veces, y la dinámica de $f(t)$ muestra una respuesta subarmónica de periodo $k\tau$, lo cual rompe explícitamente la simetría de traslación temporal discreta en un tiempo τ .

Como ejemplo, consideremos un sistema de N espines 1/2 cuya dinámica estroboscópica a tiempos $t = n\tau$ está dada por el operador de Floquet

$$U(\tau) = e^{-it_2 H} e^{-it_1 \sum_{i=1}^N \sigma_x^{(i)}} \quad (2.11)$$

donde H es un hamiltoniano de muchos cuerpos interactuantes que depende de $\sigma_z^{(i)}$, por ejemplo un modelo de Ising $H = \sum_{i=1}^N g_i \sigma_z^{(i)} \sigma_z^{(i+1)} + \sum_{i=1}^N h_i \sigma_z^{(i)}$, y $\tau = t_1 + t_2$ es el período del forzado. Si tomamos $t_1 = \pi/2$, podemos escribir $e^{-it_1 \sum_{i=1}^N \sigma_x^{(i)}} = \prod_{i=1}^N (-i) \sigma_x^{(i)}$, por lo que su efecto en la dinámica estroboscópica del sistema será invertir todos los espines en cada paso, y sus autoestados son las superposiciones

$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\{m_i\}\rangle \pm |-\{m_i\}\rangle)$, con $|\{m_i\}\rangle = |m_1 \dots m_N\rangle$. En este caso, y si H es el hamiltoniano de Ising, los autoestados del operador de Floquet se escribirán

$$|\phi^\pm(\{m_i\})\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{it_2 E_z(\{m_i\})/2} |\{m_i\}\rangle \pm e^{it_2 E_z(\{-m_i\})/2} |-\{m_i\}\rangle) \quad (2.12)$$

con autovalores $\pm e^{it_2 E_g(\{m_i\})}$, donde $E_g(\{m_i\})$ y $E_z(\{m_i\})$ son las energías provenientes de cada término de H . Notemos entonces que $|\phi^\pm\rangle$ son estados de tipo gato, y que, como $-e^{it_2 E_g(\{m_i\})} = e^{i(t_2 E_g(\{m_i\}) + \pi)}$, sus fases de Floquet asociadas están separadas por un ángulo π . Como consecuencia, para cada fase dada por conjunto de valores $\{m_i\}$ existe otra en la posición diametralmente opuesta del círculo unitario. Vale la pena mencionar que este comportamiento se da para un entorno finito del valor $t_1 = \pi/2$ elegido y que la discusión anterior es independiente del tamaño del sistema, por lo que se cumple la condición de rigidez.

En suma, vimos un ejemplo donde el sistema responde de forma subarmónica con un periodo 2τ ante un forzado de periodo τ , a su vez que las fases de la unitaria de Floquet se organizan en el círculo unitario de a pares separados por un ángulo $2\pi/2$, lo cual está asociado a que los autoestados de Floquet son superposición de 2 estados macroscópicamente distinguibles.

2.4 TROTTERIZACIÓN Y CAOS CUÁNTICO

En Refs. [10–12] se presenta la existencia de una transición a caos cuántico en sistemas trotterizados, a través de la cual los errores de Trotter proliferan. A lo largo de éstos trabajos, se desarrolla la idea de que el mecanismo de fondo para dicha proliferación es efectivamente la aparición de caos. Por otro lado, se observa que dicha transición sucede de forma repentina al atravesar algún valor del paso de Trotter, por lo que se presenta la idea de la existencia de un *threshold*. El último trabajo citado anteriormente estudia varios aspectos de la transición para tres modelos distintos, remarcando la *universalidad* de aquellos. En esta sección vamos a repasar estos resultados, presentando una transición a un régimen caótico cuántico en la trotterización de varios sistemas de espines e interpretarla en función de la relación entre sistemas trotterizados y sistemas forzados periódicamente, utilizando como ejemplo el *kicked top* [13]. Por último, vamos a discutir algunos aspectos que dicha interpretación y los resultados sobre los que se basa no dejan en claro, y cuyas respuestas son la motivación principal de esta tesis.

2.4.1 DESLOCALIZACIÓN Y PROLIFERACIÓN DE ERRORES

En Ref. [10] estudian el comportamiento de errores en la dinámica trotterizada de observables locales para un modelo de Ising con campo magnético transverso-longitudinal y lo relacionan con las propiedades de localización del sistema. Existe un régimen donde los errores sobre dichos observables son controlables, y menores a lo que sugiere la teoría a nivel del hamiltoniano, y otro donde el sistema se encuentra deslocalizado y proliferan los errores. Ambos regímenes están separados por un threshold en función del paso de Trotter, por debajo del cual se encuentra el régimen localizado y por encima el deslocalizado.

El modelo está dado por el hamiltoniano

$$H = h_x \sum_{i=1}^N S_x^{(i)} + h_z \sum_{i=1}^N S_z^{(i)} + g \sum_{i=1}^{N-1} S_z^{(i)} S_z^{(i+1)} \quad (2.13)$$

con parámetros $h/J = g/J = 1$ ($h \equiv h_z = h_x$, y tomamos $J = 1$) y se considera la trotterización

$$U(\tau) = e^{-i\tau H} \approx e^{-i\tau H_z} e^{-i\tau H_x} \quad (2.14)$$

siendo H_x el primer término del hamiltoniano y H_z los dos últimos.

Para estudiar las propiedades de localización del sistema en función del paso de Trotter, se considera una medida basada en el IPR (A.2):

$$\frac{\lambda_{IPR}}{\lambda_D} := -\frac{\log(\text{IPR})}{\log(D)} \quad (2.15)$$

donde el IPR se aplica al estado $|\psi_0\rangle = \otimes_i |\uparrow^{(i)}\rangle$ (todos los espines hacia arriba en \hat{z}) respecto a la base $\mathcal{B} = \{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^D$ de autoestados de la unitaria trotterizada, que para valores pequeños de τ corresponde a los autoestados del hamiltoniano de Floquet. Con esta definición, un valor de $\lambda_{IPR}/\lambda_D = 1$ implica deslocalización total, mientras que $\lambda_{IPR}/\lambda_D = 0$ localización total. Notemos que el estado $|\psi_0\rangle$ permanece fijo, y su localización respecto a la base \mathcal{B} cambia debido a la variación de ésta misma en función del paso de Trotter. Como podemos apreciar en la figura 2.1, existe un valor crítico $\tau^* \approx 1.3(h^{-1})$ a partir del cual el estado se deslocaliza rápidamente en la base de la unitaria trotterizada a medida que se incrementa el paso de Trotter.

Los restantes gráficos en la figura 2.1 muestran el valor medio temporal de la magnetización (A.1) en función del paso de Trotter, y su error en comparación con el caso ideal ($\tau = 0$): $\Delta\langle\langle\bar{J}_z\rangle\rangle_t = \langle\bar{J}_z\rangle_t - \langle\bar{J}_z\rangle_t^{\tau=0}$, donde el estado inicial fue el $|\psi_0\rangle$ ya

mencionado. Vemos que existe una correlación entre la deslocalización del sistema, su desmagnetización y la proliferación de errores.

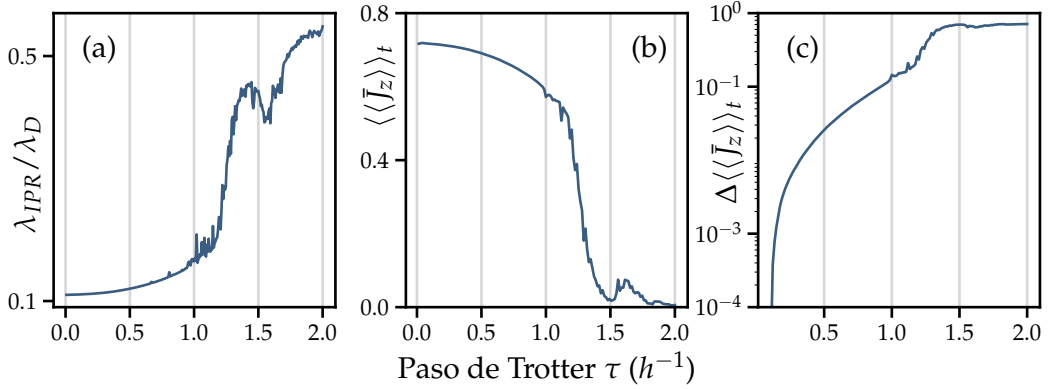


Figura 2.1: Comportamiento de varias cantidades en función del paso de Trotter. **(a)** Localización del estado $|\psi_0\rangle = \otimes_i |\uparrow^{(i)}\rangle$ en la base de autoestados de la unitaria trotterizada (2.14) para $N = 13$ espines. **(b)** Valor medio temporal de la magnetización y **(c)** su error en comparación con el caso ideal ($\tau = 0$) para $N = 11$ espines. El estado inicial es el $|\psi_0\rangle$ ya mencionado, y para cada valor de τ la evolución se hizo por un tiempo $t = 800(h^{-1})$.

2.4.2 CAOS EN LA TROTTERIZACIÓN DEL MODELO DE ISING A2A

En Refs. [11, 12] estudian, entre otros, un modelo de Ising con interacciones a larga distancia. En particular, interacciones de todos los espines con todos los demás (modelo de Ising A2A). Como en la sección anterior, se estudia la localización en el sistema y la proliferación de errores, pero con nuevas medidas. Además se estudian las propiedades espectrales del sistema, como la estadística de autovalores y autovectores de la unitaria Trotterizada (ver apéndice B), en función del paso de Trotter.

Al igual que en el caso anterior, en este modelo se encuentra una transición repentina que separa dos regímenes, uno localizado donde los errores de observables locales se mantienen controlados y otro deslocalizado donde proliferan. A su vez, la estadística espectral del sistema indica una clara transición al caos.

El hamiltoniano del modelo es

$$H = h_x \sum_{i=1}^N S_x^{(i)} + g_x \sum_{i<j}^N S_x^{(i)} S_x^{(j)} + h_z \sum_{i=1}^N S_z^{(i)} + g_z \sum_{i<j}^N S_z^{(i)} S_z^{(j)} \quad (2.16)$$

y notando que

$$\sum_{i < j}^N S_\mu^{(i)} S_\mu^{(j)} = \frac{1}{2} \sum_{ij}^N S_\mu^{(i)} S_\mu^{(j)} = \frac{1}{2} \left(\sum_i^N S_\mu^{(i)} \right) \left(\sum_j^N S_\mu^{(j)} \right) = \frac{1}{2} S_\mu^2$$

donde $S_\mu = \sum_{i=1}^N S_\mu^{(i)}$ es el operador de espín colectivo, podemos reescribir el hamiltoniano como

$$H = h_x S_x + \frac{g_x}{2} S_x^2 + h_z S_z + \frac{g_z}{2} S_z^2 \quad (2.17)$$

Como se conserva el impulso angular total del sistema $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$, pues $[S^2, H] = 0$, la dinámica se desarrolla en un subespacio del Hilbert con espín total definido j . En particular, tomando el subespacio de máximo espín total $j = N/2$, los operadores de espín colectivos se reducen a los operadores de impulso angular J_μ para una partícula con espín j . Así, la dimensión del espacio de Hilbert se ve reducida a $D = 2j + 1 = N + 1$. Notemos que, si bien empezamos con un sistema de muchos cuerpos, la dinámica se reduce a la de una única partícula con espín j .

Se suele introducir un reescaleo de los parámetros $g_\mu \rightarrow 2g_\mu / (2j + 1)$, con lo que el hamiltoniano queda

$$H = H_x + H_z = h_x J_x + \frac{g_x}{2j+1} J_x^2 + h_z J_z + \frac{g_z}{2j+1} J_z^2 \quad (2.18)$$

Los parámetros toman valores $g_z := g$, $h_z = 0.3g$, $g_x = 0.7g$ y $h_x = 0.1g$. En particular, para lo que sigue tomamos $g = 1$.

La trotterización considerada para este modelo es

$$U(\tau) = e^{-i\tau H} \approx e^{-i\tau H_z} e^{-i\tau H_x} \quad (2.19)$$

Inspeccionemos primero la dinámica del sistema. Las figuras que siguen muestran la dinámica entera del sistema en función del paso de Trotter. Para cada valor de τ hacemos una simulación del sistema utilizando la unitaria trotterizada. El eje y izquierdo muestra el avance del tiempo para un τ determinado, mientras que el eje y derecho, asociado a la línea sólida, muestra el promedio temporal para cada evolución. Para las simulaciones que siguen tomamos $N = 128$ ($j = 64$), y el estado inicial es todos los espines hacia arriba en \hat{z} .

En la figura 2.2 mostramos la evolución de la magnetización (A.1) y analizamos la localización en la dinámica mediante el PR del estado evolucionado (A.3) sobre la base del operador de espín total colectivo S_z . El estado inicial se encuentra

localizado sobre esta base, de forma tal que $\text{PR}(t = 0) = 1/D$. Para la magnetización, podemos observar que la dinámica del observable local mantiene su periodicidad (o cuasiperiodicidad) hasta un valor de $\tau^* \approx 0.45(2\pi g^{-1})$ a partir del cual este aspecto de la dinámica se pierde completamente, a su vez que el estado del sistema deja de ser polarizado, y la magnetización decrece hasta anularse. Tal despolarización puede ser interpretada rápidamente al observar la localización del estado del sistema. Para $\tau < \tau^*$ la cadena se encuentra aproximadamente polarizada —cerca de su estado inicial— durante toda la evolución y por lo tanto en un estado localizado. Cruzado el valor crítico el sistema se deslocaliza rápidamente, y al extenderse por todos los estados posibles la magnetización decrece. Sin embargo, notemos que la deslocalización no es total, sino que satura en $\text{PR} \approx 0.5$, lo cual puede entenderse en función de teoría de matrices aleatorias (RMT) [11]. Tanto la pérdida de periodicidad en el sistema como la deslocalización de su estado sugieren dinámica caótica cuántica más allá de τ^* , lo cual es reforzado por la predicción del PR mediante RMT.

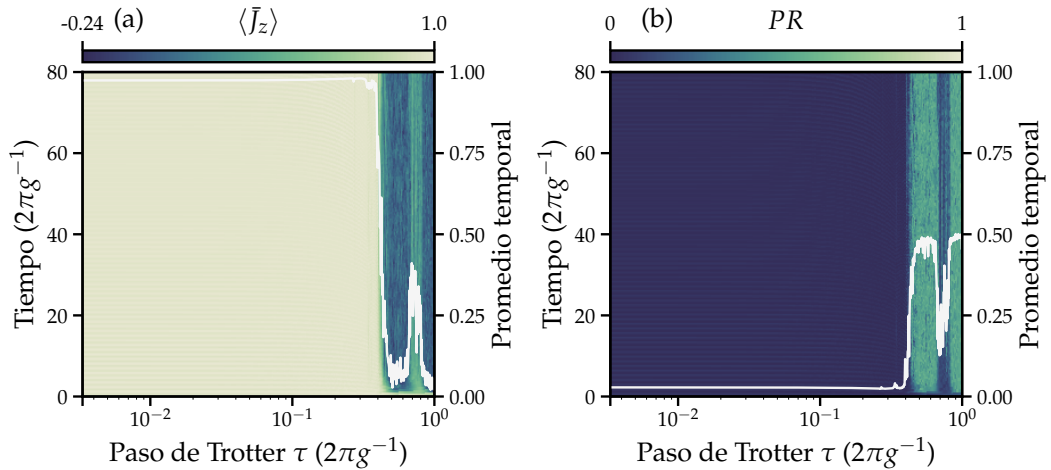


Figura 2.2: Dinámica del sistema en función del paso de Trotter. **(a)** Magnetización. **(b)** Localización del estado evolucionado.

La figura 2.3 muestra medidas de error en la dinámica del sistema, que comparan la evolución ideal (sin trotterizar) con la trotterizada. Éstas son la fidelidad de simulación (A.4) y el error en la magnetización (A.5). A medida que se avanza en el valor del paso de Trotter, podemos observar tres regímenes en la fidelidad. Partiendo de una región de muy alta fidelidad para valores pequeños de τ , a medida que éste aumenta surgen oscilaciones periódicas cuya amplitud aumenta junto al paso de Trotter. En la segunda región la dinámica se vuelve cuasiperiódica, y la

fidelidad empieza a decrecer rápidamente. La tercera región queda definida por el mismo valor crítico τ^* , a partir del cual la fidelidad se vuelve nula. En el error en la magnetización también se pueden observar tres regiones: en la primera el error crece linealmente con el paso de Trotter, como se espera que suceda con una discretización temporal. Luego el error satura, entrando en la segunda región para aproximadamente el mismo valor de τ que con la fidelidad. Por último, el error salta rápidamente al cruzar el valor crítico, saturando en un nuevo valor. Para ambas medidas la forma funcional en las primeras dos regiones podrían describirse analíticamente, lo cual indica la posibilidad de controlar los errores. Este no es el caso una vez ocurrida la transición.

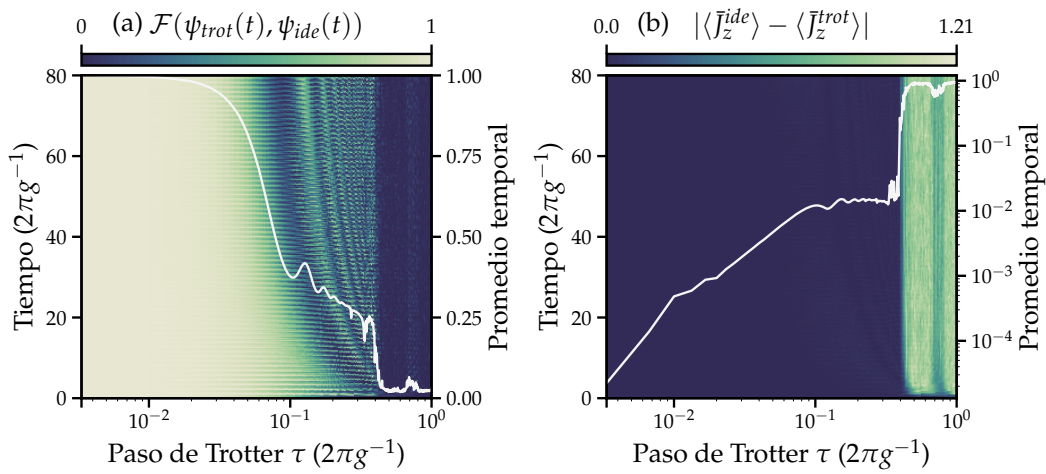


Figura 2.3: Medidas de error en la dinámica del sistema en función del paso de Trotter. **(a)** Fidelidad de simulación. **(b)** Error en la magnetización.

Por último, veamos el comportamiento del espectro del sistema en función del paso de Trotter. Como detallamos en el apéndice B, tanto la estadística de niveles como de autoestados del sistema puede ser utilizada para diagnosticar la presencia de caos cuántico. Para cuantificar la estadística de niveles utilizamos el promedio del cociente de espaciado de niveles $\langle \tilde{r} \rangle$ (B.2) y para detectar la estadística en los autoestados del sistema utilizamos un test de Kolmogorov-Smirnov t_{RMT}^{KS} (B.7) comparando la distribución cumulativa obtenida a partir del operador de Floquet respecto a la base de autoestados del operador de espín J_z , con aquella proveniente de las distribuciones teóricas para cada ensamble. En la figura 2.4 mostramos dichas medidas aplicadas al espectro de la unitaria trotterizada, las cuales indican una clara transición (que ocurre aproximadamente para el valor

crítico $\tau^* \approx 0.45(2\pi g^{-1})$ antes visto) al caos, siendo que dicho espectro posee estadística que concuerda con la del ensamble ortogonal en ambos casos.

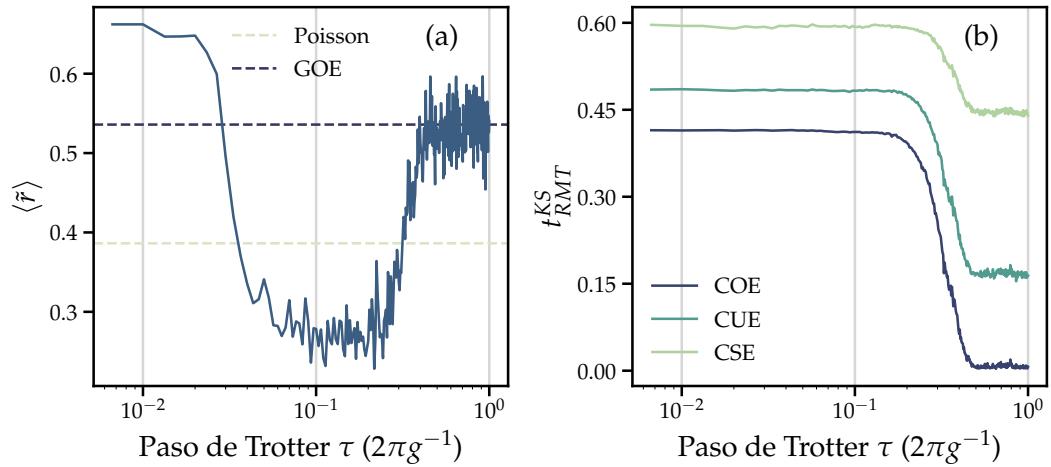


Figura 2.4: Medidas espectrales de caos cuántico aplicadas al operador de Floquet en función del paso de Trotter. **(a)** Promedio del cociente de espaciado de fases. **(b)** Test de Kolmogorov-Smirnov comparando la distribución cumulativa correspondiente a los autoestados de la unitaria con las distribuciones cumulativas teóricas para cada ensamble.

En lo que sigue conectaremos los resultados ya exployados con la transición al caos en un modelo relacionado al actual, brindando una interpretación a la proliferación de errores observada en función del caos.

2.4.3 EL KICKED TOP Y CAOS CUÁNTICO

La transición al caos en función del paso de Trotter en el sistema anteriormente estudiado puede entenderse a partir del kicked top, cuyo hamiltoniano es

$$H(t) = hJ_x + kJ_z^2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - n\tau) \quad (2.20)$$

y posee una transición al caos [13] en función de la intensidad del forzado k . Éste sistema posee límite clásico y es un ejemplo paradigmático de las conjeturas BGS y de Berry-Tabor (para más detalle ver el apéndice B) para sistemas dependientes del tiempo, pues posee estadística de espaciado de fases en concordancia con RMT en su régimen caótico, correspondiéndose con la proliferación de caos en el límite clásico. A su vez, es un ejemplo donde la estadística de autoestados de su operador de Floquet se corresponde también con matrices aleatorias [21] en dicho régimen.

La conexión entre el kicked top y el hamiltoniano de Ising con interacciones de todos los espines entre sí estudiado anteriormente surge a partir de la conexión entre sistemas trotterizados y sistemas forzados periódicamente que exploramos en la sección 2.2. Al haber trotterizado la evolución del hamiltoniano de Ising de la forma (2.19), la dinámica que realiza éste operador se corresponde con el hamiltoniano delta-forzado

$$H(t) = h_x J_x + \frac{g_x}{2j+1} J_x^2 + \left(h_z J_z + \frac{g_z}{2j+1} J_z^2 \right) \tau \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - n\tau) \quad (2.21)$$

que posee una forma muy similar al hamiltoniano del kicked top (2.20). Como consecuencia, al trotterizar la evolución del sistema dado por (2.18) se introduce un forzado periódico cuya intensidad aumenta con el paso de Trotter. Luego, la transición al caos del kicked top al aumentar la intensidad del forzado implica una transición al caos al aumentar el valor de τ . Dado que la dinámica ideal del sistema (sin trotterizar) es integrable, esto implica necesariamente que la expansión de Trotter-Suzuki ya no describe el sistema original y la simulación falla, dando a lugar la proliferación de errores.

Resumen y observaciones

En esta sección exploramos algunos resultados previos mostrando la existencia de una transición repentina en la dinámica de sistemas trotterizados, en la cual la aproximación de Trotter deja de funcionar y proliferan los errores. Este fenómeno está acompañado por una transición al caos, según lo indican tanto la localización dinámica del sistema como los indicadores espectrales de caos usuales. Por último, interpretamos la proliferación de errores en uno de los modelos estudiados en función del caos cuántico del kicked top. Esto refuerza la idea de que el mecanismo de fondo para la transición observada en la trotterización de éstos sistemas es efectivamente el desarrollo de caos cuántico.

Sin embargo esta interpretación deja lugar a algunas preguntas, que motivan esta tesis:

- ◊ Ante lo observado, se propone como mecanismo genérico para la proliferación de errores de Trotter la aparición de caos cuántico en la dinámica efectiva del sistema, **¿es realmente el caos cuántico el**

mecanismo de fondo, o existen sistemas donde los errores proliferan sin la generación de caos?

- ◇ De serlo, usualmente las transiciones al caos son suaves en función del parámetro de caos, **¿por qué, entonces, existe un threshold?**
- ◇ La mayoría de los sistemas estudiados en los trabajos anteriores son integrables en el límite de paso de Trotter pequeño¹. Si es que el mecanismo de fondo es el caos cuántico, **¿qué sucede en la trotterización de un sistema que ya es caótico cuántico?**

El modelo de Ising de la sección 2.4.1 es caótico, pero sin embargo allí [10] se habla de una transición al caos. En todo caso, sí existe una transición en la cual el sistema se deslocaliza significativamente, y que entenderemos en el siguiente capítulo.

3 RESULTADOS

En este capítulo presentaremos los resultados principales de la tesis, los cuales obtuvimos buscando responder las preguntas planteadas al final del capítulo anterior, y dividimos en cuatro secciones. La primera de ellas es la sección 3.1, donde estudiamos la dinámica trotterizada en función del paso de Trotter de un modelo que posee una transición integrabilidad-caos paramétrica, con el cual podremos investigar la proliferación de errores en un modelo que ya es caótico. En la sección 3.2 estudiaremos la robustez de algunos de los resultados previos expuestos en el capítulo anterior, pero también de los resultados obtenidos para el modelo que acabamos de mencionar, en función de la condición inicial del sistema en las simulaciones. La tercera sección 3.3 estudia la dinámica trotterizada en función del paso de Trotter para un modelo integrable el cual posee una trotterización que preserva su integrabilidad. En las secciones hasta aquí mencionadas encontraremos la existencia de "islas de estabilidad" en la trotterización de éstos sistemas para ciertos valores del paso de Trotter, y de su estudio se ocupa la sección 3.4.

3.1 MODELO DE ISING CON CAMPO MAGNÉTICO

El primer modelo que estudiamos es un modelo de Ising con campo magnético transverso-longitudinal e interacciones antiferromagnéticas. Este sistema posee una transición integrabilidad-caos según la relación entre las componentes h_x y h_z del campo magnético, por lo que nos es útil para explorar la trotterización de sistemas caóticos. Su hamiltoniano está dado por

$$H = \sum_{i=1}^N h_x \sigma_x^{(i)} + h_z \sigma_z^{(i)} - g \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_z^{(i)} \sigma_z^{(i+1)} \quad (3.1)$$

Notemos que, salvo un cambio en la notación de los parámetros del sistema, las interacciones antiferromagnéticas, y factores $1/2$ en las matrices de Pauli, éste es el mismo sistema que el de la sección 2.4.1.

Debido a que los acoplamientos con los campos y entre los espines son uniformes a lo largo de la cadena, y que ésta es abierta, el sistema posee simetría de reflexión respecto a su centro. Como consecuencia se conserva el operador de paridad, el cual intercambia la posición de cada espín con el de su opuesto simétrico. Sea el operador de intercambio $P_{(i,j)}$, que intercambia los espines en los sitios i y j , el intercambio de un espín en la posición i con su opuesto simétrico es efectuado por $P_{(i,N+1-i)}$. Luego, el operador de paridad se expresa

$$P = \prod_{i=1}^{\lfloor \frac{N}{2} \rfloor} P_{(i,N+1-i)} \quad (3.2)$$

Su conservación implica que, al descomponer el Hilbert $H = H_{impar} \oplus H_{par}$, la dinámica queda totalmente contenida en uno de estos subespacios siempre y cuando el estado inicial respete también la simetría de paridad. La dimensión de cada subespacio es $D_{impar/par} \approx D/2$, si D es la dimensión del espacio de Hilbert total, que para este sistema es $D = 2^N$.

El régimen integrable de este sistema se da cuando $h_z \gg h_x$ (campo totalmente longitudinal) o cuando $h_x \gg h_z$ (campo totalmente transversal) y caótico cuando ambas componentes son comparables $h_z \approx h_x$. En la figura 3.1 mostramos la caoticidad del sistema en función del parámetro h_z cuantificada mediante las medidas espectrales usuales, fijados $h_x = 1$ y $g = 1$, para $N = 10$ espines. Podemos encontrar ambos regímenes mencionados con los siguientes conjuntos de parámetros:

Integrable: $h_x = g, h_z = 3g$

Caótico: $h_x = g, h_z = 0.5g$

donde tomamos $g = 1$ para todos los cálculos hechos.

Con motivo de estudiar la universalidad mencionada consideramos varias trotterizaciones de primer orden basadas en la descomposición $H = H_x + H_z + H_i$, donde el primer término es la interacción de los espines con la componente \hat{x} del campo, el segundo la interacción con la componente \hat{z} y el último la interacción entre los espines. Las trotterizaciones consideradas fueron:

$$U(\tau) = e^{-i\tau H} \approx U_{i-zx}(\tau) := e^{-i\tau H_i} e^{-i\tau(H_z + H_x)} \quad (3.3)$$

$$U(\tau) = e^{-i\tau H} \approx U_{iz-x}(\tau) := e^{-i\tau(H_i + H_z)} e^{-i\tau H_x} \quad (3.4)$$

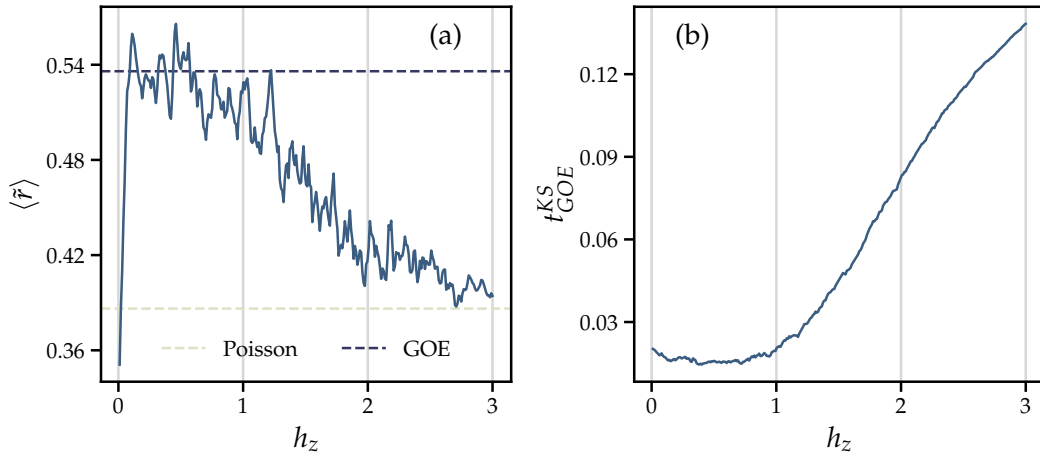


Figura 3.1: Caoticidad del sistema en función de la magnitud de la componente longitudinal del campo magnético, según (a) el promedio del cociente de espaciado de niveles, (b) un test de Kolmogorov-Smirnov comparando la distribución acumulativa proveniente de la estadística de autoestados del hamiltoniano, obtenida respecto a la base de autoestados del sistema desacoplado ($g = 0$), con la distribución correspondiente al ensamble ortogonal.

$$U(\tau) = e^{-i\tau H} \approx U_{ix-z}(\tau) := e^{-i\tau(H_i+H_x)} e^{-i\tau H_z} \quad (3.5)$$

y las denominamos $i-zx$, $iz-x$ e $ix-z$, respectivamente. Con esta notación, la trotterización $iz-x$ aquí definida es análoga a la trotterización (2.14) utilizada en la sección 2.4.1. Todas estas trotterizaciones preservan la simetría de paridad del sistema original $[P, U_{i-zx}(\tau)] = [P, U_{iz-x}(\tau)] = [P, U_{ix-z}(\tau)] = 0$.

A continuación mostramos los resultados provenientes de la trotterización $i-zx$. Relegamos los resultados de las trotterizaciones $iz-x$ e $ix-z$ al apéndice C.1, pues si bien nos fueron útiles para interpretar aquellos que presentaremos a continuación, la mayoría de los aspectos que deseamos resaltar ya son aparentes aquí. Analizamos el comportamiento de la dinámica, los errores y las características espectrales de la unitaria trotterizada en función del paso de Trotter, con los mismos cuantificadores que mostramos para el modelo de Ising con interacciones a larga distancia (sección 2.4.2). Para cada trotterización, lo hicimos tanto con los parámetros tales que el sistema es integrable como con los que es caótico (en el límite de paso de Trotter pequeño) que ya definimos. En todas las simulaciones de la dinámica del sistema tomamos como estado inicial $|\psi_0\rangle = \otimes_i |\downarrow^{(i)}\rangle$ (todos los espines hacia abajo en \hat{z}). Éste es autoestado del operador de espín total colectivo S_z , y por lo tanto se encuentra localizado en su base de autoestados, y es la que

utilizamos como referencia para cuantificar la localización del sistema en todas las evoluciones hechas. Como mencionamos, este modelo conserva paridad y por lo tanto la dinámica se desarrolla en un subespacio de paridad definida, cuya simetría respeta el estado inicial elegido. Debido a esto todas las simulaciones fueron hechas habiendo reducido el hamiltoniano al subespacio de paridad positiva. Para todas las simulaciones de la dinámica tomamos $N = 8$, y para las medidas espectrales $N = 10$, con lo que la dimensión efectiva del Hilbert es $D_{par} = 136$ y $D_{par} = 528$ respectivamente.

La figura 3.2 muestra la dinámica de la magnetización (A.1) y la localización del sistema según el PR (A.3) con parámetros integrables en el límite de paso de Trotter pequeño. Lo que observamos es substancialmente distinto a los resultados para el modelo de Ising A2A (figura 2.2). Si bien aún se distingue una transición, pues la dinámica del sistema cambia abruptamente, no hay un valor de τ para el cual la transición se "estacione" y la cadena quede totalmente desmagnetizada. La localización del sistema concuerda con esta última observación, ya que el estado evolucionado no se deslocaliza significativamente, y por lo tanto tampoco alcanza un valor que indique dinámica caótica cuántica. El comportamiento en función del paso de Trotter más allá de la transición es errático y vemos la presencia de "islas de estabilidad" donde la dinámica parece volverse regular y localizada. Estas islas suceden cuando el paso de Trotter coincide con ciertas periodicidades del sistema, y son el objeto de estudio de la sección 3.4. Cabe mencionar que su existencia ya había sido notada en Ref. [11], y en principio podríamos identificar el pico más allá de la transición en el modelo de Ising A2A (ver la figura 2.2 y menos notable en 2.3) como una de ellas, pero más débil.

En cuanto a las medidas de error en la dinámica (la fidelidad de simulación (A.4) y el error en la magnetización (A.5)) del sistema con parámetros integrables (figura 3.3), persisten en gran medida los tres regímenes que habíamos remarcado anteriormente para el modelo de Ising A2A: errores controlados pequeños que aumentan en una región de cuasiperiodicidad, y luego crecen rápidamente durante la transición. También en las medidas de error la transición está marcada por un comportamiento errático y la presencia de islas. Respecto a éstas, notemos que si bien tanto la fidelidad como el error en la magnetización alcanzan valores comparables con aquellos previos a la transición, inspeccionando la dinámica de la magnetización en la figura 3.2 podemos ver que en las islas el sistema se encuentra totalmente polarizado en la dirección $-\hat{z}$ durante toda la evolución, que no es lo que sucede en la dinámica ideal. Una última observación es la presencia de "picos" para valores

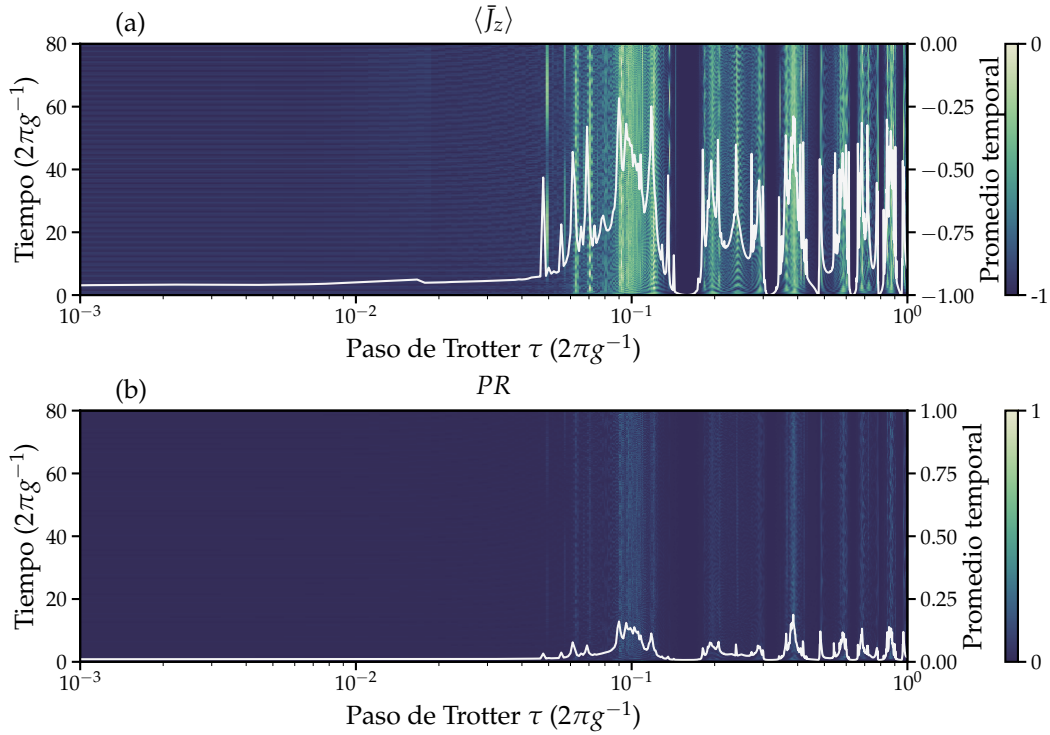


Figura 3.2: Dinámica del sistema en función del paso de Trotter con parámetros integrables y utilizando la trotterización i-zx (3.3). **(a)** Magnetización. **(b)** Localización del estado evolucionado.

particulares de τ donde la dinámica simulada se desvía de la ideal incluso antes de la transición, en la región cuasiperiódica, donde previamente sugerimos que los errores eran corregibles.

La figura 3.4 muestra la caoticidad del sistema en función del paso de Trotter cuantificada según las medidas ya establecidas, aún con parámetros integrables. Vemos tanto en la estadística de espaciado de fases como en los autoestados de la unitaria trotterizada que, si bien deja de haber acuerdo con integrabilidad al aumentar el paso de Trotter, no hay una transición clara a caos cuántico, sino que, al igual que vimos en la dinámica, hay fluctuaciones que nunca se estacionan en algún valor correspondiente a los ensambles. Sin embargo, cabe notar que ambas medidas muestran comportamiento integrable en las islas.

Para esta combinación de sistema, parámetros y trotterización hallamos una transición en función del paso de Trotter con varias características que difieren de lo visto anteriormente en el modelo de Ising A2A. Aquí encontramos que existe una transición a partir de la cual proliferan los errores de Trotter, y estos son aproxi-

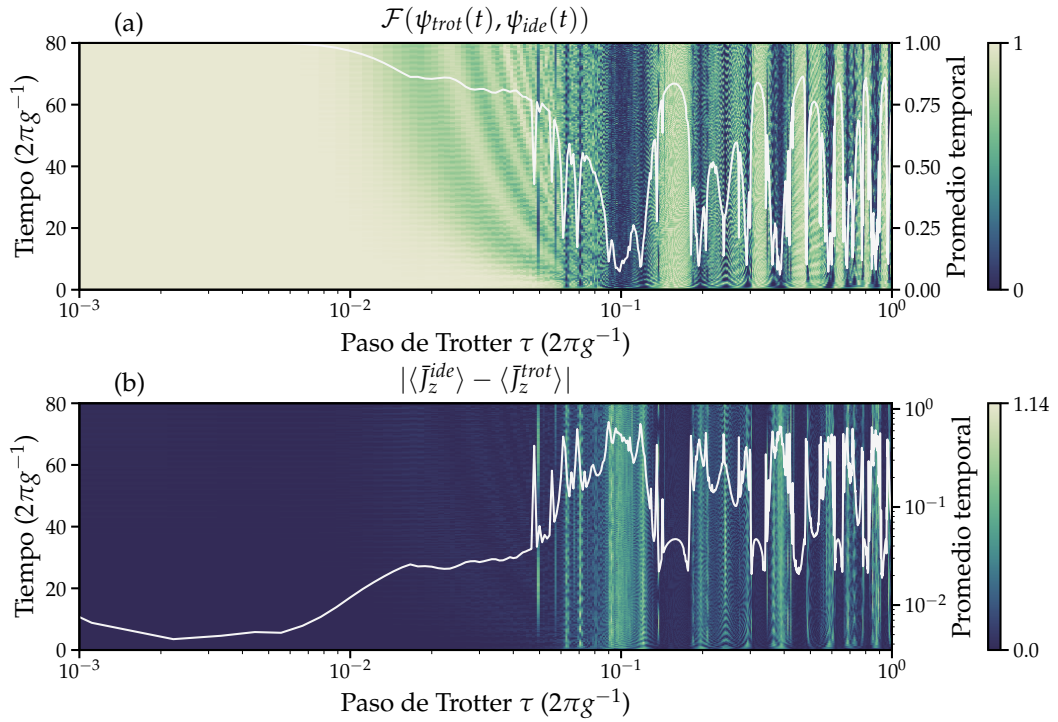


Figura 3.3: Error en la dinámica del sistema en función del paso de Trotter con parámetros integrables y utilizando la trotterización i-zx (3.3), cuantificado mediante la (a) fidelidad de simulación y el (b) error en la magnetización.

madamente de la misma magnitud que en aquel caso. Sin embargo, tanto la localización dinámica del sistema como la estadística espectral de la unitaria trotterizada no muestran una transición clara a caos. La presencia de las islas introduce incertidumbre a las conclusiones que se podrían obtener de lo observado: podría ser que su cantidad y densidad sea tal que no permita que la estadística se estacione, y si se examinasen las figuras anteriores con una mayor densidad de puntos en función de τ se lograría ver que fuera de las islas sí se tiene estadística indicando caos cuántico. De hecho, veremos más adelante ejemplos donde hay menor densidad de islas y fuera de ellas el sistema exhibe comportamiento caótico. Dicho esto, la densidad de puntos utilizada fue igual para todas las figuras anteriores (excepto en la estadística de autoestados, donde es menor), y podemos ver que fuera de las islas cada medida de error alcanza aproximadamente un mismo valor. Vale la pena mencionar que se ha observado la proliferación de errores de Trotter sin una transición al caos en ciertos sistemas de espines, para valores del paso de Trotter anteriores al threshold [22].

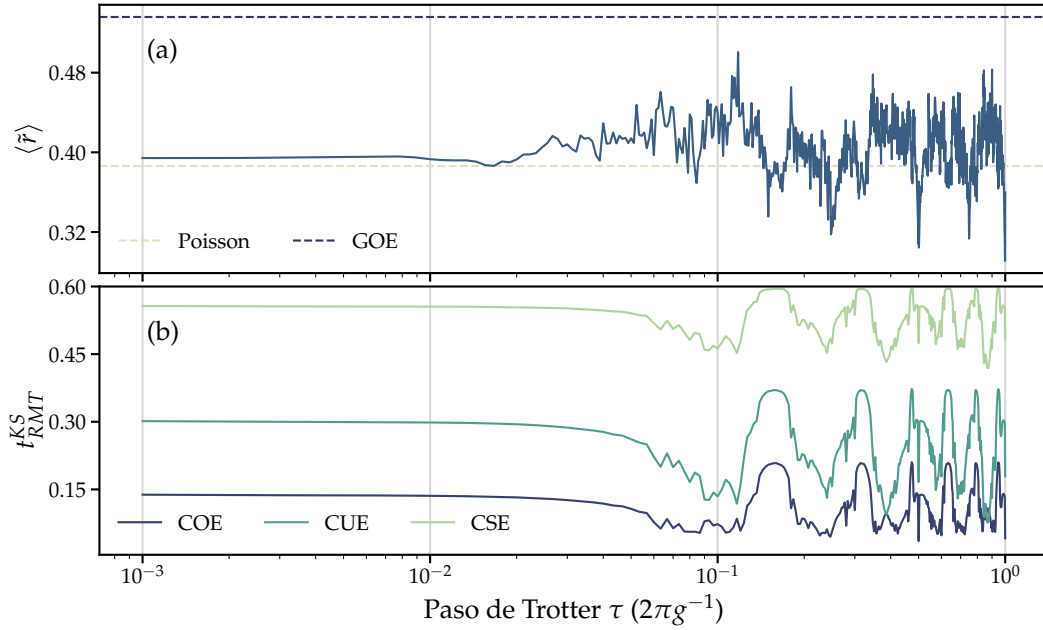


Figura 3.4: Caoticidad del sistema en función del paso de Trotter con parámetros integrables y utilizando la trotterización i - z - x (3.3), según (a) el promedio del cociente de espaciado de fases y (b) un test de Kolmogorov-Smirnov comparando la distribución cumulativa correspondiente a los autoestados de la unitaria trotterizada, obtenida respecto a la base de autoestados del hamiltoniano desacoplado ($g = 0$), con las distribuciones cumulativas teóricas para cada ensamble.

Inspeccionemos ahora la transición para parámetros donde el sistema ya es caótico en el límite de paso de Trotter pequeño. La figura 3.5 muestra resultados para la magnetización y la localización de la dinámica que resultan similares a lo que sucede con el modelo de Ising A2A, pues hay una transición repentina donde el sistema se deslocaliza y consecuentemente también se desmagnetiza. A diferencia de aquel modelo, aquí tenemos islas de estabilidad donde, al igual que en el caso integrable, la cadena se encuentra totalmente polarizada durante toda la evolución. Sin embargo, sí podemos ver que fuera de las islas el PR satura en un valor indicativo de caoticidad ($PR \approx 0.5$ como ya mencionamos en la sección 2.4.2, [11]). Antes de la transición el sistema ya es caótico, y por lo tanto tiende a deslocalizarse. Esto explica la mayor variabilidad de la magnetización en función del tiempo, y por lo tanto también el mayor promedio temporal de la misma para cada evolución, a su vez que implica un aumento del promedio temporal del PR, en comparación con el caso integrable. Una posible pregunta que puede surgir al observar el compor-

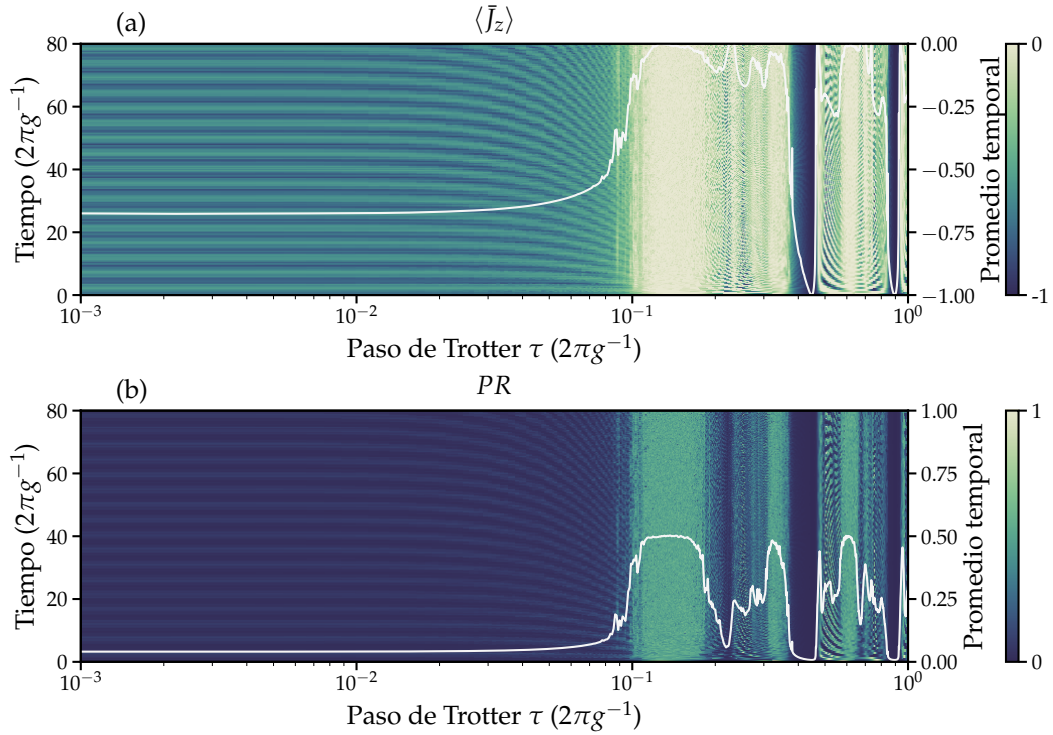


Figura 3.5: Dinámica del sistema en función del paso de Trotter con parámetros caóticos y utilizando la trotterización i - zx (3.3). **(a)** Magnetización. **(b)** Localización del estado evolucionado.

tamiento de la localización en función del paso de Trotter es: si el sistema ya era caótico, y por lo tanto tiende a deslocalizarse, ¿por qué se encuentra relativamente localizado antes de la transición? Una posible respuesta se encuentra en la conservación de la energía. Si bien antes de la transición ya hay caos, los estados que puede ocupar el sistema están limitados a un subespacio de energía. Al aumentar el paso de Trotter, la equivalencia entre trotterizar un sistema y forzarlo (ver sección 2.4.3) rompe con la conservación haciendo disponible una fracción mucho mayor del Hilbert. Qué fracción del mismo será ocupada podría ser descrito mediante RMT.

En la figura 3.6 vemos, en los errores de la simulación en función del paso de Trotter, las mismas tres regiones que ya notamos y mencionamos en figuras anteriores, y la presencia de las islas. Una consecuencia de que en este caso el sistema tienda a deslocalizarse ya para paso de Trotter pequeño, y que por lo tanto la cadena no se encuentre aproximadamente polarizada durante toda su evolución, es que el error en las islas no se ve tan reducido como en el caso integrable, si bien la reducción

sigue siendo apreciable. Notemos que en ambos casos la cadena se encuentra totalmente polarizada durante toda la evolución para valores de τ en las islas. Esto nos dice que no se puede esperar que en aquellas los errores sean pequeños para un estado inicial arbitrario. Esto se hará evidente cuando estudiemos la dependencia de los errores en función del estado inicial, en la sección 3.2 y el apéndice C.2. Como último comentario respecto a los errores, notemos una diferencia entre el caso caótico y el integrable: en el primero los errores aumentan significativamente más en la región cuasiperiódica.

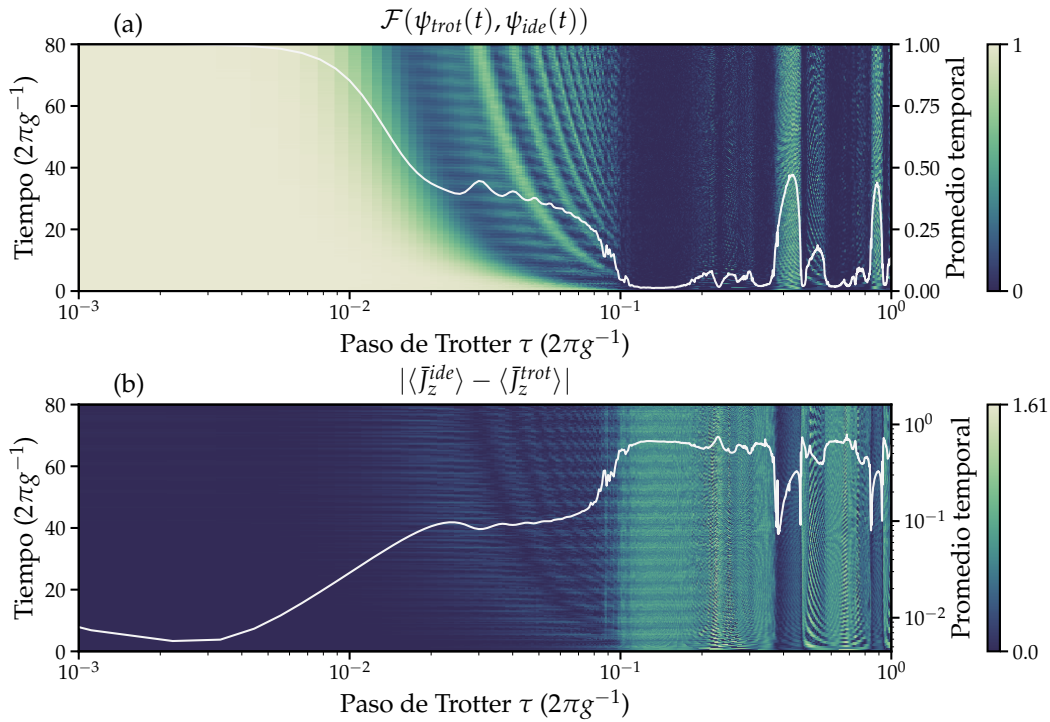


Figura 3.6: Error en la dinámica del sistema en función del paso de Trotter con parámetros caóticos y utilizando la trotterización i - z x (3.3), cuantificado mediante la (a) fidelidad de simulación y el (b) error en la magnetización.

Según lo muestra la figura 3.7, la estadística de espaciado de fases de la unitaria trotterizada no indica una transición al caos, pues el sistema ya es caótico antes de la proliferación de errores. Sin embargo, hay un cambio cualitativo en su comportamiento, que se ve en el alejamiento de la estadística del ensamble ortogonal, para luego volver una vez hecha la transición en $\tau > \tau^* \approx 0.1(2\pi g^{-1})$, aunque con fluctuaciones. Luego, en las islas se reduce la repulsión de fases para dar a lugar a estadística poissoniana, indicando integrabilidad en aquellas regiones. Notemos

que las islas son más aparentes en las medidas espectrales. Por ejemplo, la isla en $\tau \approx 0.25(2\pi g^{-1})$ se ve claramente en el espaciado de fases, y es particularmente visible en el PR pero no tanto en la magnetización y los errores, donde parece tener el efecto de aumentarlos. Las mismas observaciones son válidas para la estadística de autoestados dado que, para todo valor del paso de Trotter fuera del área de transición y de las islas, siempre concuerda con alguno de los ensambles, indicando caos cuántico. Un aspecto interesante en el que ésta medida difiere del espaciado de fases, es que ocurre un intercambio de simetrías durante la transición. Para valores de τ pequeños la estadística corresponde con el ensamble ortogonal, al igual que vimos en la figura 3.1, pero a medida que se entra en la región cuasiperiódica hay menos acuerdo con éste ensamble, y más acuerdo con el unitario, de forma tal que el acuerdo con el último es total para $\tau > \tau^*$, excepto en algunas regiones donde la relación se invierte. Recordemos que el ensamble unitario está asociado a sistemas sin simetría de inversión temporal (ver el apéndice B).

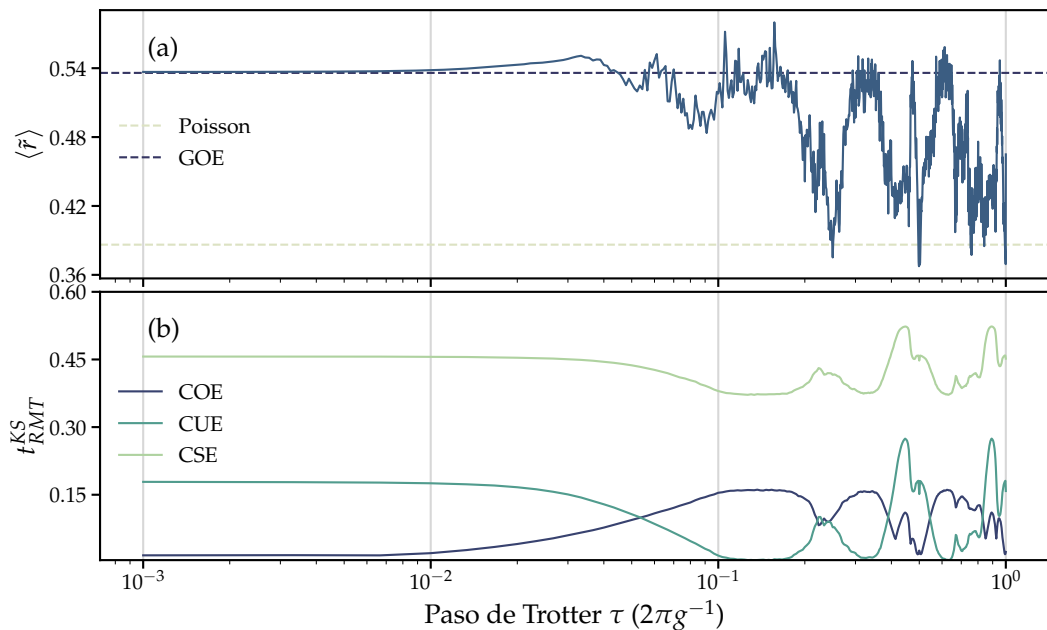


Figura 3.7: Caoticidad del sistema en función del paso de Trotter con parámetros caóticos y utilizando la trotterización i-zx (3.3), según (a) el promedio del cociente de espaciado de fases y (b) un test de Kolmogorov-Smirnov comparando la distribución cumulativa correspondiente a los autoestados de la unitaria trotterizada, obtenida respecto a la base de autoestados del hamiltoniano desacoplado ($g = 0$), con las distribuciones cumulativas teóricas para cada ensamble.

Para el régimen caótico (en el límite de paso de Trotter pequeño) de este modelo y trotterización encontramos en la dinámica del sistema resultados que se asimilan a los del modelo de Ising A2A. Salvo la mayor presencia de islas, el comportamiento de la simulación en función del paso de Trotter es cualitativamente similar a aquél modelo, en cuanto a la desmagnetización y deslocalización simultánea de la cadena y la forma y magnitud de la proliferación de errores. Sin embargo, hay una diferencia fundamental, y es que en este caso no podemos correlacionar la proliferación de errores con el surgimiento de caos cuántico en función del paso de Trotter, pues el sistema es caótico antes y después de la transición, aunque la estadística de autoestados de la unitaria trotterizada sufre un cambio de ensamble indicando la pérdida de simetría de inversión temporal en el sistema efectivo. Si bien uno podría plantear el correlato entre el crecimiento de errores con este cambio de simetría, notemos que para el modelo de Ising A2A la simetría es la misma para todo τ más allá de la transición (figura 2.4), lo cual está asociado a que el operador de Floquet (2.19) posee simetría de inversión temporal [13,21].

Antes de avanzar con el resto de resultados de estas tesis, discutamos por qué la trotterización i - zx preserva la integrabilidad del modelo cuando éste ya lo es en el límite de paso de Trotter pequeño, lo cual no sucede para las otras dos trotterizaciones propuestas (ver el apéndice C.1). Recordemos que este sistema (sin trotterizar) tiene una transición al caos paramétrica en función de la relación entre las amplitudes del campo magnético h_x y h_z , de forma tal que la dinámica es integrable cuando $h_z \gg h_x$, y caótica cuando $h_x \approx h_z$. Es decir, la caoticidad del sistema está enteramente contenida en la relación entre estos dos parámetros (siempre y cuando sean ambos también comparables con la interacción g). La peculiaridad de la trotterización i - zx es que preserva esta relación, pues los trata en pie de igualdad, de forma tal que cuando $h_z \gg h_x$ la acción del operador H_x en la unitaria trotterizada 3.3 será despreciable y el operador de espín total colectivo S_z será una simetría del sistema, tanto en el límite de $\tau \ll 1$ como $\tau \gg 1$.

Resumen y observaciones

En esta sección exploramos la dinámica, proliferación de errores de Trotter y estadística espectral para un modelo con transición integrabilidad-caos paramétrica para valores pequeños del paso de Trotter, con el afán de responder algunas de las preguntas planteadas al final de la sección 2.4. Para ambos regímenes del modelo encontramos que **existe una transición en fun-**

ción del paso de Trotter de forma tal que **prolifera los errores**. También hallamos la presencia de **islas de estabilidad** donde la dinámica se vuelve regular, aunque no necesariamente es una buena representación de la ideal, y allí los errores pueden disminuir dependiendo del estado inicial del sistema. Fuera de éstas la proliferación de errores es cualitativamente similar al modelo de Ising A2A. Sin embargo, **para el caso integrable no encontramos una transición al caos en función del paso de Trotter** la cual correlacionar con dicha proliferación de errores, sino que la dinámica del sistema se encuentra relativamente localizada, y la estadística espectral del sistema efectivo oscila sin nunca alcanzar un acuerdo con RMT. Esto es debido a que la trotterización preserva la relación entre los parámetros de caos del sistema original. Por otro lado, **para el caso caótico tampoco encontramos una transición en la estadística del espectro**, pues ésta indica caoticidad para todo valor del paso de Trotter.

3.2 DEPENDENCIA CON EL ESTADO INICIAL

Para los resultados obtenidos hasta ahora utilizamos estados iniciales completamente polarizados. Tal elección no es arbitraria, en la medida que son estados relevantes por la sencillez de su preparación en un simulador cuántico. Sin embargo, desde un punto de vista fundamental, es necesario analizar la robustez de los resultados anteriormente obtenidos en función del estado inicial elegido. En esta sección haremos esto repitiendo los cálculos ya hechos tomando una base completa (o un gran conjunto de la misma) de estados como condición inicial, de forma tal que tendremos una noción del comportamiento que obtendríamos para un estado inicial arbitrario. Lo haremos para los resultados previos sobre la localización del modelo de Ising en la sección 2.4.1, y también para los que obtuvimos en la sección precedente 3.1 con dos de sus trotterizaciones.

Empezamos retomando el resultado previo para la localización del modelo de Ising con campo magnético transversal-longitudinal que mostramos en la sección 2.4.1. Allí vimos una transición en función del paso de Trotter en la cual el estado $|\psi_0\rangle = \otimes_i |\uparrow^{(i)}\rangle$ se deslocaliza repentinamente en la base de la unitaria trotterizada (2.14) para un valor de $\tau = \tau^* \approx 1.3(\hbar^{-1})$, introduciendo la idea de un *threshold* en función del paso de Trotter (figura 2.1.a). Repetimos aquellos cálculos pero ahora tomando como $|\psi_0\rangle$ cada estado de la base de autoestados del operador de espín

total colectivo S_z . Nos limitamos a considerar sólo aquellos con paridad definida positiva, y tomamos $N = 10$, lo cual equivale a haber considerado ≈ 250 estados iniciales. El motivo de esta elección no fue nada más que para reducir la carga de cómputo.

Los resultados se encuentran en la figura 3.8, donde resaltamos la curva correspondiente al estado originalmente considerado en la figura 2.1.a (tener en cuenta que en aquel caso $N = 13$, y aquí $N = 10$), y graficamos también el promedio de todas las curvas correspondientes a los distintos estados iniciales. Vemos que el estado considerado originalmente no es representativo del comportamiento medio de cada estado en la base, sino que posee una transición relativamente pronunciada. Si bien existen varios estados para los cuales la transición es tal, podemos ver que no es el caso para la gran mayoría de ellos, como lo indica el promedio.

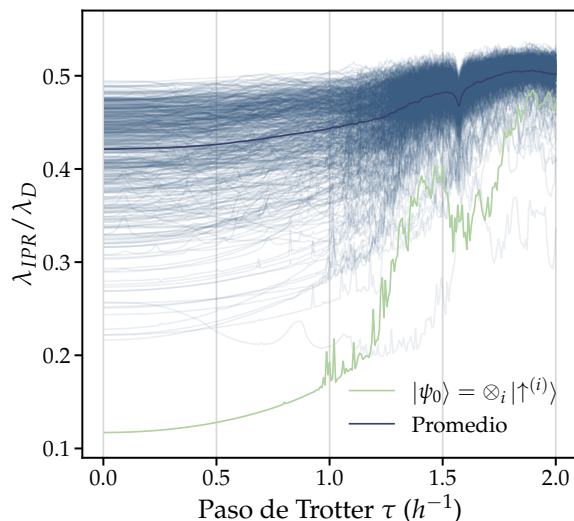


Figura 3.8: Localización de cada autoestado del operador de espín colectivo S_z en la base de autoestados de la unitaria trotterizada (2.14) en función del paso de Trotter para $N = 10$ espines. La curva resaltada en verde corresponde al estado considerado originalmente en la figura 2.1.a, y la curva de tono oscuro indica el promedio de todas las demás.

Ahora inspeccionamos la dependencia de los resultados obtenidos en la dinámica del modelo de Ising con campo magnético transversal-longitudinal (sección 3.1) con el estado inicial elegido. Originalmente consideramos el estado $|\psi_0\rangle = \otimes_i |\downarrow^{(i)}\rangle$, y al igual que en el caso anterior, ahora consideramos todos los autoestados del operador de espín total colectivo S_z . Si bien mantuvimos el tamaño del sistema ($N = 8$), para reducir la carga de cómputo consideramos sólo estados con paridad positiva,

y en este caso nos limitamos a sólo la mitad de ellos (tomados uniformemente), totalizando 69 posibles estados iniciales.

Las figuras 3.9 y 3.10 muestran el valor medio temporal en función del paso de Trotter de la localización dinámica y las medidas de error utilizadas originalmente para la trotterización i-zx (sección 3.1), con parámetros integrables y caóticos respectivamente. En el apéndice C.2 se pueden encontrar los resultados para la trotterización ix-z, y son ampliamente análogos. En cada gráfico resaltamos la curva correspondiente al estado originalmente considerado en las figuras 3.2, 3.3 (parám. integrables) 3.5 y 3.6 (parám. caóticos), e incluimos el promedio de todas las curvas. De nuevo, vemos en ambos casos que el estado inicial totalmente polarizado que

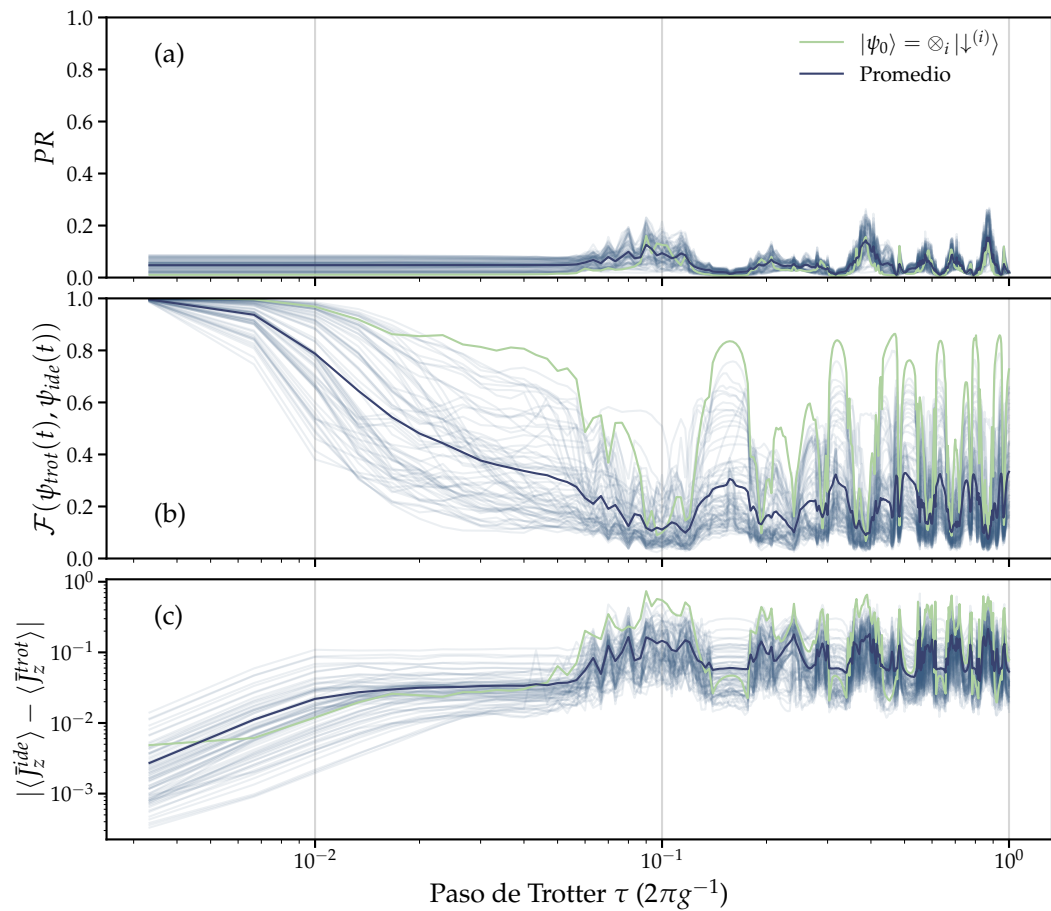


Figura 3.9: Localización y medidas de error en la dinámica del sistema (3.1) en función del paso de Trotter con parámetros integrables y utilizando la trotterización i-zx (3.3), para distintos estados iniciales. **(a)** Localización del estado evolucionado. **(b)** Fidelidad de simulación. **(c)** Error en la magnetización. En verde se resalta la curva proveniente del estado inicial ya considerado en la sección 3.1 y en azul oscuro se marca el promedio de todas las curvas.

utilizamos originalmente no es necesariamente representativo del comportamiento de un estado arbitrario. En todos los casos (excepto en la figura 3.9.a) el estado resaltado desarrolla una dinámica en función del paso de Trotter de forma tal que la transición resulta bastante más pronunciada que para un estado promedio. En suma, el promedio de las curvas correspondientes a cada estado indica que para un estado inicial arbitrario la transición será suave, al menos para el tamaño de sistema considerado.

En cuanto a la localización del sistema con régimen integrable todos los estados iniciales llevan a un comportamiento similar. Esto tiene sentido, pues la integrabilidad del sistema en el límite de paso de Trotter pequeño asegura que la dinámica

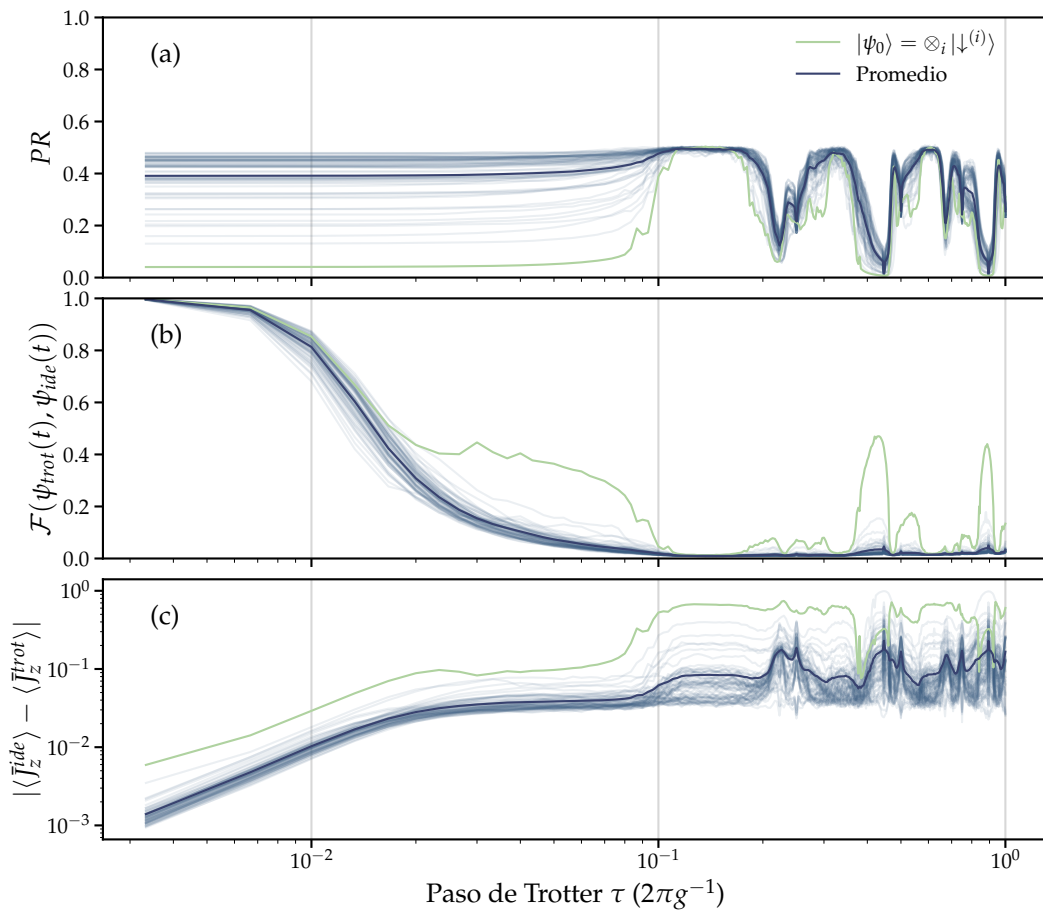


Figura 3.10: Localización y medidas de error en la dinámica del sistema (3.1) en función del paso de Trotter con parámetros caóticos y utilizando la trotterización i-zx (3.3), para distintos estados iniciales. **(a)** Localización del estado evolucionado. **(b)** Fidelidad de simulación. **(c)** Error en la magnetización. En verde se resalta la curva proveniente del estado inicial ya considerado en la sección 3.1 y en azul oscuro se marca el promedio de todas las curvas.

de la cadena tenderá a deslocalizarse, pero no lo hará por igual para cada estado inicial. Esto puede entenderse por la conservación de la energía, por la cual un estado que en un inicio se encuentra aproximadamente localizado en la base de autoestados del hamiltoniano no podrá deslocalizarse demasiado sin romper con la conservación. Por ejemplo, el estado totalmente polarizado posee $IPR \approx 0.42$ en la base de autoestados del hamiltoniano (3.1) indicando un gran grado de localización, a la vez que es el estado cuya dinámica es más localizada en la figura 3.10.a. Observamos que esta misma relación entre localización del estado inicial en la base de autoestados del hamiltoniano y localización dinámica media en la base del operador de espín total colectivo S_z se cumple para todos los estados considerados. Más allá de la transición todos los estados se deslocalizan por igual. Bajo la observación anterior, si allí no se conserva la energía, hay una fracción del Hilbert mucho más amplia disponible a cada estado inicial. Por otro lado, los autoestados de la unitaria trotterizada cumplen con RMT (figura 3.7), y por lo tanto cualquier estado inicial es deslocalizado por igual.

En las medidas de error podemos hacer algunas observaciones. Para empezar, verificamos la hipótesis hecha en la sección 3.1 de que no se puede esperar que en las islas los errores se reduzcan significativamente para un estado inicial arbitrario. La segunda observación es que en el caso integrable hay una gran dispersión en función del estado inicial elegido y para todo valor de τ , tanto para la fidelidad de simulación como para el error en la magnetización, lo cual no sucede con parámetros caóticos, donde el error posee mucha menos dependencia con el estado inicial.

Las observaciones hechas para esta trotterización valen también para la ix-z, cuyos resultados se encuentran en el apéndice C.2.

Resumen y observaciones

En esta sección estudiamos la robustez de los resultados anteriormente obtenidos en función del estado inicial elegido, tanto en la localización del modelo estudiado en la sección 2.4.1 como en la dinámica y errores de aquel en la sección 3.1. En ambos hallamos que el comportamiento del estado originalmente considerado no es representativo de uno arbitrario, sino que es particularmente distinguible de todos los otros estados en la base del operador S_z total, dando a lugar a una transición más pronunciada en la mayoría de los casos. Considerando el promedio sobre dicha base, encontramos que **en promedio la transición es suave**, en contraste con la idea de un thresh-

old, al menos para los tamaños de sistema utilizados. **Este hecho se presentaba ya en las medidas espectrales**, las cuales son globales en el sentido en que no dependen de un estado particular elegido. Comparemos la transición en la dinámica del modelo de Ising A2A (figura 2.2) con aquella en su espectro (figura 2.4). En la dinámica la transición sucede en un rango $\Delta\tau \approx 0.1(2\pi g^{-1})$, mientras que en la estadística espectral $\Delta\tau \approx 0.3(2\pi g^{-1})$.

3.3 MODELO DE HEISENBERG CON ANISOTROPÍA

En esta sección estudiamos la simulación en función del paso de Trotter para un modelo de Heisenberg con interacciones XXZ. El motivo para elegir este sistema es su utilización en la Ref. [23], en donde aplican una trotterización que preserva la integrabilidad del sistema. Sin embargo, estudian únicamente los efectos en función del paso de Trotter en el ensamble de Gibbs generalizado que describe los valores de expectación de observables en el límite de tiempos largos. En ese trabajo encuentran que para pasos de Trotter pequeños la dependencia del ensamble con τ se puede describir analíticamente, pero que existe una transición señalizada por la aparición de magnetización no nula. Aquí investigaremos este modelo y trotterización mediante las medidas ya establecidas en secciones anteriores.

El hamiltoniano del sistema en cuestión es

$$H = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^N \sigma_x^{(i)} \sigma_x^{(i+1)} + \sigma_y^{(i)} \sigma_y^{(i+1)} + \Delta(\sigma_z^{(i)} \sigma_z^{(i+1)} - 1) \quad (3.6)$$

donde tomamos el parámetro de anisotropía $\Delta = 2$ y consideramos N par. Este modelo es integrable, con una gran cantidad de conservaciones locales [24]. En particular, conserva la paridad (3.2) y la componente \hat{z} del espín total $S_z = \sum_{i=1}^N S_z^{(i)}$. Además, como los parámetros son homogéneos y la cadena es cerrada (identificamos $\sigma_\mu^{(N+1)} \equiv \sigma_\mu^{(1)}$), es invariante ante la traslación de toda la cadena en un sitio. El operador de traslación T que realiza esta transformación puede ser escrito como un producto de operadores de intercambio de sitio $P_{(i,j)}$ sucesivos

$$T = \prod_{i=1}^N P_{(i,i+1)} \quad (3.7)$$

tal que, por ejemplo $T|abc\rangle = P_{(1,2)}P_{(2,3)}|abc\rangle = P_{(1,2)}|acb\rangle = |cab\rangle$.

Como mencionamos, el interés por este modelo reside en la existencia de una trotterización que preserve la integrabilidad del sistema, pues introduce un amplio número de conservaciones locales [25]. La unitaria trotterizada está definida a partir del operador unitario de dos cuerpos

$$V_{(i,i+1)}(\tau) = e^{-i\frac{\pi}{4}[\sigma_x^{(i)}\sigma_x^{(i+1)} + \sigma_y^{(i)}\sigma_y^{(i+1)} + \Delta(\sigma_z^{(i)}\sigma_z^{(i+1)} - 1)]} \quad (3.8)$$

que podemos leer como un operador de evolución para el subsistema de los sitios i e $i + 1$. Luego, la trotterización considerada es $U(\tau) \approx U_e(\tau)U_o(\tau)$ donde

$$U_e(\tau) = \prod_{i=1}^{N/2} V_{(2i-1,2i)}(\tau) \quad \text{y} \quad U_o(\tau) = \prod_{i=1}^{N/2} V_{(2i,2i+1)}(\tau) \quad (3.9)$$

La acción de esta unitaria consiste en dos pasos, en el primero se evolucionan todas las parejas de sitios impares (2,3), (4,5), etc. y en el segundo todas las parejas de sitios pares (1,2), (3,4), etc. (cada una independientemente de las demás), como esquematizamos en la figura 3.11. Cabe notar que esta trotterización rompe con la

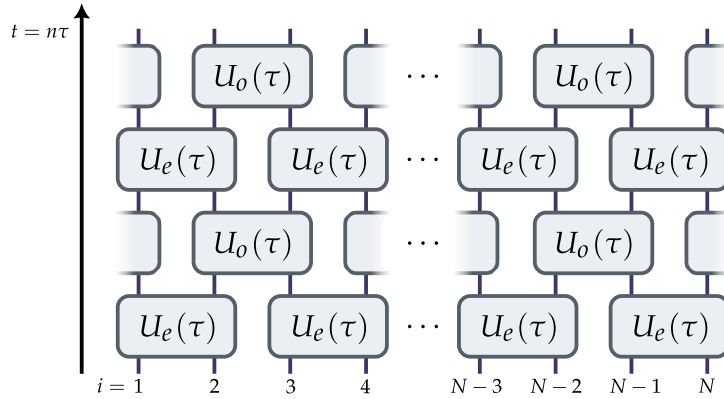


Figura 3.11: Esquema de la evolución implementada por la unitaria trotterizada (3.9).

simetría de traslación en un sitio T presente en el sistema original, mientras que preserva la simetría de paridad y S_z . Sin embargo, sí posee simetría de traslación en dos sitios $[T^2, U(\tau)] = 0$.

Para las simulaciones de la dinámica que mostraremos a continuación tomamos como estado inicial el estado de Néel $|\psi_0\rangle = \otimes_{i=1}^{N/2} |\downarrow^{(2i-1)} \uparrow^{(2i)}\rangle$, el cual es autoestado de S_z y T^2 , pero no tiene simetría de paridad ni de traslación en un sitio. Debido a que este sistema conserva S_z , en lugar de la magnetización consideramos la dinámica de la polarización del primer espín $\langle \sigma_z^{(1)} \rangle$, y su medida de error asociada

(A.6). A pesar de las conservaciones de este modelo, no redujimos el hamiltoniano a algún subespacio con S_z , P y/o T^2 definido para realizar las siguientes simulaciones. Esto es debido a que observamos diferencias en la dinámica a tiempo largo entre el sistema completo y el sistema reducido, que adjudicamos a la posible introducción de errores numéricos. No vimos que esto sucediese en otros modelos. Por último, las simulaciones fueron hechas con $N = 8$ espines.

Los resultados para la dinámica del observable y la localización del sistema se encuentran en la figura 3.12, y muestran algo muy distinto de lo visto para modelos anteriores. Si bien el efecto de variar el paso de Trotter es visible en la cuasiperiodicidad del sistema, no existe una transición señalizada por un cambio repentino en el promedio temporal de la polarización del primer espín, sino que se mantiene aproximadamente constante para todo valor de τ , excepto alrededor de $\tau = 0.5(2\pi)$ donde hay una isla. Debido a la integrabilidad del sistema y su trotterización no es sorpresa que la dinámica se encuentre localizada, incluso para pasos de Trotter grandes, aunque sí vemos que existe algún grado de deslocalización. El comportamiento del PR en este caso se asimila a aquél en la figura 3.2, aunque con menos fluctuaciones.

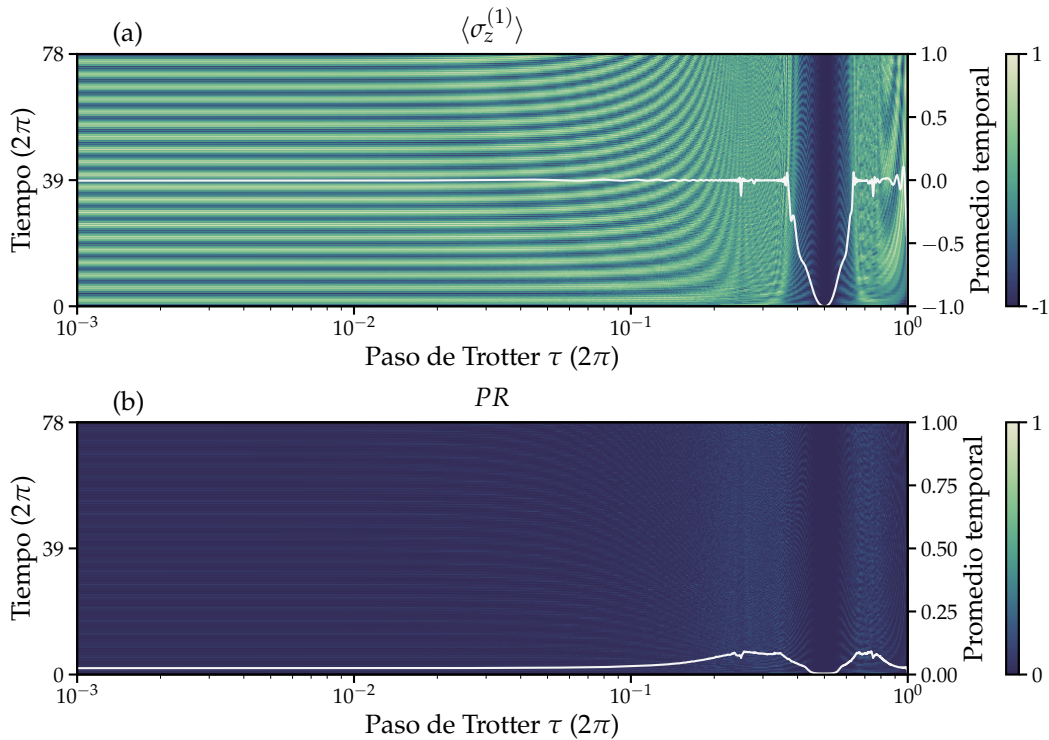


Figura 3.12: Dinámica del sistema en función del paso de Trotter. (a) Polarización del primer espín. (b) Localización del estado evolucionado.

La figura 3.13 muestra que tampoco hay una transición clara en las medidas de error. En ambas podemos identificar las primeras dos regiones que mencionamos en el modelo de Ising A2A y de Ising con campo transverso-longitudinal (figuras 2.3, 3.3 y 3.6), la primera de fidelidad alta y crecimiento lineal del error en el observable local, y la segunda en la región de cuasiperiodicidad donde la primera decae y el último satura. Sin embargo no existe un valor particular del paso de Trotter para el cual haya un aumento apreciable del error en ninguna de las medidas. Esto podría ser un efecto del estado inicial elegido, pues como vimos (sección 3.2 y apéndice C.2) pueden existir muchos estados iniciales para los cuales no hay un aumento particularmente alto del error. Un aspecto a tener en cuenta es la aparición de fluctuaciones, que podrían indicar que las cantidades estudiadas no pueden ser descritas analíticamente. Dichas fluctuaciones aparecen aproximadamente para el mismo valor del paso de Trotter donde aumenta la deslocalización del sistema $\tau \approx 0.2(2\pi)$.

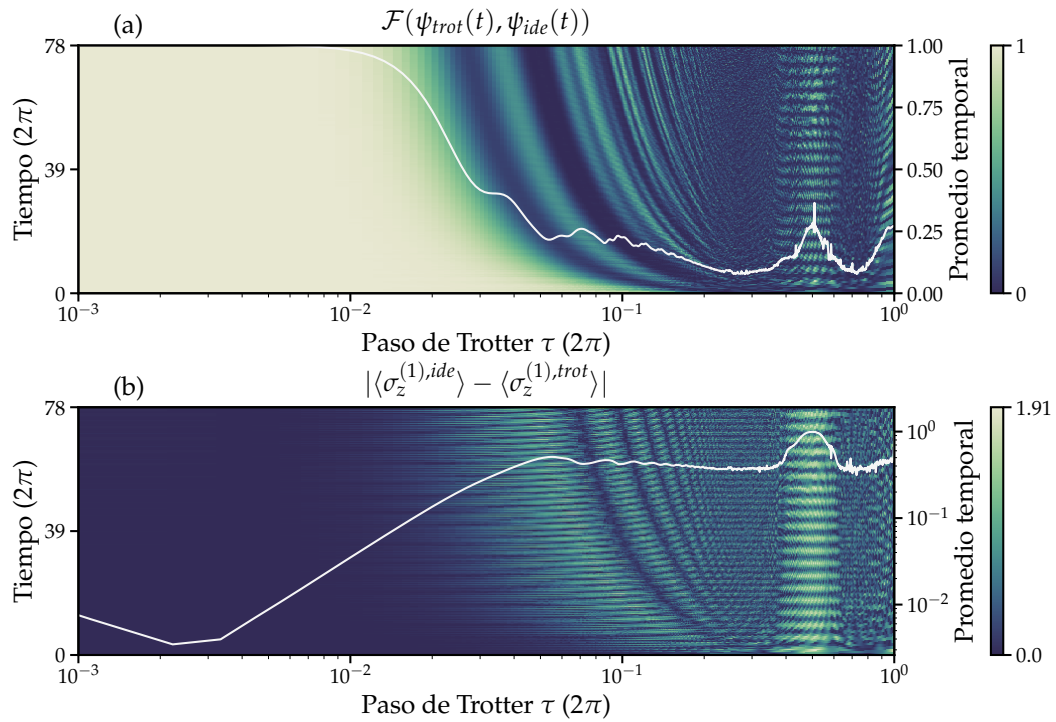


Figura 3.13: Error en la dinámica del sistema en función del paso de Trotter cuantificado mediante la (a) fidelidad de simulación y el (b) error en la polarización del primer espín.

Recordemos que para cuantificar la caoticidad mediante el espaciado de niveles/fases es necesario desimetrizar el sistema, es decir, reducirlo a un subespacio de simetría con números cuánticos definidos y así eliminar degeneraciones (como mencionamos en el apéndice B.1). Este sistema tiene una gran cantidad de cantidades conservadas, pero en principio para estudiar la estadística de niveles nos limitamos a considerar las conservaciones "triviales" [26, 27] T , P y S_z . Para los resultados en esta sección desimetrizamos respecto a S_z y P , pues fue suficiente para dar lugar a estadística correspondiente con alguno de los valores universales y, por otro lado, porque la trotterización aquí utilizada rompe con la simetría de traslación en un sitio. Verificamos que si lo hacemos con las tres conservaciones anteriores obtenemos un resultado que no concuerda con ninguna clase de universalidad para valores grandes del paso de Trotter, ya que allí se hace relevante la ruptura de la simetría T que introduce la trotterización. Sin embargo, sí consideramos también la posibilidad de desimetrizar respecto a T^2 , P y S_z , y obtuvimos un resultado análogo al que exponemos a continuación.

En la figura 3.14 mostramos la estadística de espaciado de niveles, habiendo desimetrizado con $P = 1$ y $S_z = 1$, y para $N = 14$. El acuerdo es con estadística poissoniana, indicando integrabilidad para todo valor del paso de Trotter, excepto en valores de τ correspondientes a las islas, en las cuales simetrías adicionales producen degeneraciones, dando a lugar a estadística subpoissoniana.

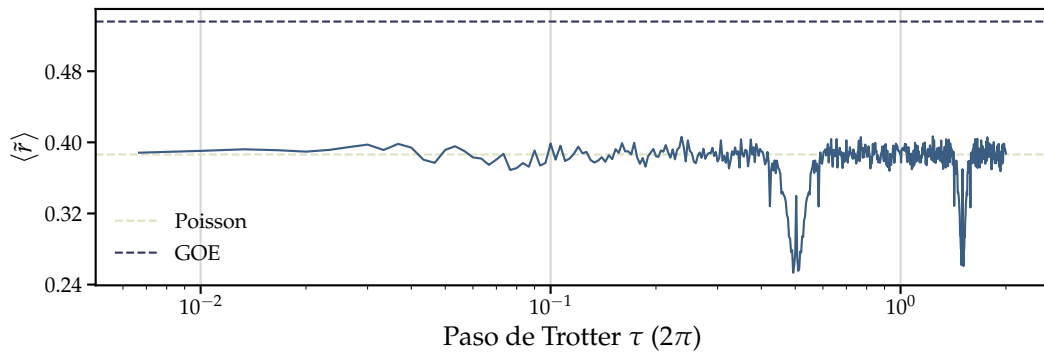


Figura 3.14: Caoticidad del sistema en función del paso de Trotter según el promedio del cociente de espaciado de fases.

Resumen y observaciones

En esta sección estudiamos la dinámica, proliferación de errores de Trotter y la estadística del espectro para un modelo integrable que posee una trotterización que conserva tal propiedad. Tanto en la dinámica como en las medidas de error, **no hallamos una transición abrupta clara**, donde la dinámica cambie repentinamente y los errores aumenten apreciablemente. En todo caso, ya vimos que tal característica puede depender del estado inicial elegido. **Para todo valor del paso de Trotter** el sistema se mantiene localizado, y **la estadística de niveles indica integrabilidad**. De haber una transición de algún tipo, quizás podríamos definirla según la posibilidad de describir los errores de manera analítica, pues **los errores empiezan a percibir fluctuaciones en función del paso de Trotter** para valores que coinciden con el pequeño pero perceptible aumento en la deslocalización de la dinámica.

3.4 ISLAS DE ESTABILIDAD

En secciones anteriores vimos, en ambos el modelo de Ising con campo magnético transversal-longitudinal y el modelo de Heisenberg con anisotropía, la aparición de "islas de estabilidad" en función del paso de Trotter, en las cuales la dinámica es localizada y la estadística espectral indica integrabilidad. En esta sección hacemos una inspección más cercana a este aspecto de la dinámica trotterizada. Empezamos describiendo el caso sencillo de la trotterización $iz-x$ para el modelo de Ising, y analizaremos las demás trotterizaciones. En cada caso, identificaremos las islas como fases de cristal temporal de Floquet inducidas por un forzado periódico, según lo muestran los indicadores que explayamos en la sección 2.3, en algunos casos de forma estricta y en otros aproximada.

Para tener una mejor perspectiva sobre el comportamiento de las islas, en la figura 3.15 nos concentramos en el PR del modelo de Ising con campo magnético transversal-longitudinal que tratamos en la sección 3.1 para las tres trotterizaciones definidas, y hasta valores del paso de Trotter mayores. Vemos que para la trotterización $iz-x$ ((c) y (d)) hay una periodicidad estricta de las islas en función de τ , mientras que en $i-zx$ ((a) y (b)) e $ix-z$ ((e) y (f)) hay variabilidad según régimen integrable o caótico. Para estas dos trotterizaciones, algunas islas se dan periódicamente, mientras otras parecen poseer cuasiperiodicidad en función de τ .

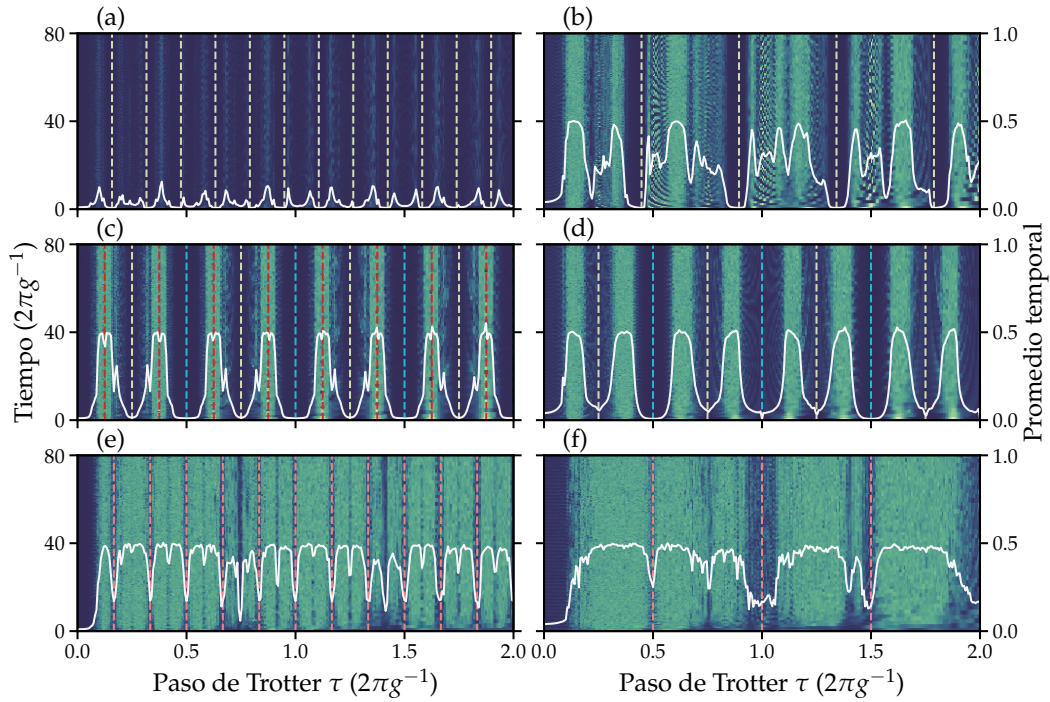


Figura 3.15: Localización del estado evolucionado en función del paso de Trotter para el modelo de Ising con campo transversal longitudinal y las trotterizaciones i - z - x ((a) y (b)), i - z - x ((c) y (d)), y i - x - z ((e) y (f)). Los gráficos en la columna izquierda corresponden a parámetros integrables, y en la derecha caóticos en el límite de paso de Trotter pequeño. Las líneas verticales marcan islas que son mencionadas en el texto.

A continuación analizaremos de forma exacta el caso de las trotterizaciones i - z - x e i - x - z .

3.4.1 ISLAS DE LA TROTTERIZACIÓN i - z - x

Como muestran las figuras 3.15.c y 3.15.d, para la trotterización i - z - x existen islas comunes a los parámetros integrables y caóticos, y se encuentran en valores del paso de Trotter $\tilde{\tau}_n = \frac{n}{4}(2\pi g^{-1})$ (líneas verde claro y cian para n impar y par, respectivamente). Para ambos conjuntos de parámetros se tiene $PR = 1/D$ (con $D = D_{par} = 136$) en estos valores de τ , indicando que la dinámica se encuentra siempre localizada en la base de autoestados del operador S_z .

Para entenderlo, notemos que el operador de Floquet trotterizado (3.4) es exactamente un caso particular del ejemplo que vimos en la sección 2.3. Efectivamente, para n impar la dinámica es periódica con período $2\tilde{\tau}_n$ y en cada paso temporal

los espines de la cadena se invierten, polarizándola totalmente en la dirección \hat{z} en un paso, y totalmente en la dirección $-\hat{z}$ en el siguiente. Para n par el estado del sistema diferirá del inicial sólo en una fase $\forall k \in \mathbb{N}$, por lo que la dinámica es esencialmente constante. Comportamientos tales son justamente lo que vemos que sucede en estas islas (ver figuras C.1 y C.4).

Para el régimen integrable de esta misma trotterización existe al menos un conjunto más de "islas" que se encuentran entre medio de las ya vistas (líneas rojas en la figura 3.15.c), de forma tal que, en total, para parámetros integrables hay en $\tilde{\tau}_n = \frac{n}{8}(2\pi g^{-1})$ con $n \in \mathbb{N}$. Aquellas con n impar existen sólo para el régimen integrable, por lo que su existencia depende del parámetro h_z . Además observamos que su periodicidad tiene dependencia con el número de espines en la cadena, de forma tal que para mayor N , menor la frecuencia con la que responde el sistema. Como ejemplo, en la figura 3.16 mostramos un fragmento de la dinámica de la magnetización para los tres tipos de islas aquí discutidas, con parámetros integrables, $N = 8$ y estado inicial $|\psi_0\rangle = \otimes_i |\downarrow^{(i)}\rangle$, por un tiempo $t = 300(2\pi g^{-1})$. Acompañamos los gráficos anteriores con su espectro en frecuencias, mostrando que para $n = 1$ el sistema responde con un período $12\tilde{\tau}_1$. Recordemos que estamos usando como unidades de tiempo $2\pi g^{-1}$, por lo que la frecuencia asociada es $f = \frac{1}{12\tilde{\tau}_1} = \frac{1}{12}(\frac{1}{8}2\pi g^{-1})^{-1} = \frac{2}{3}(g/2\pi)$.

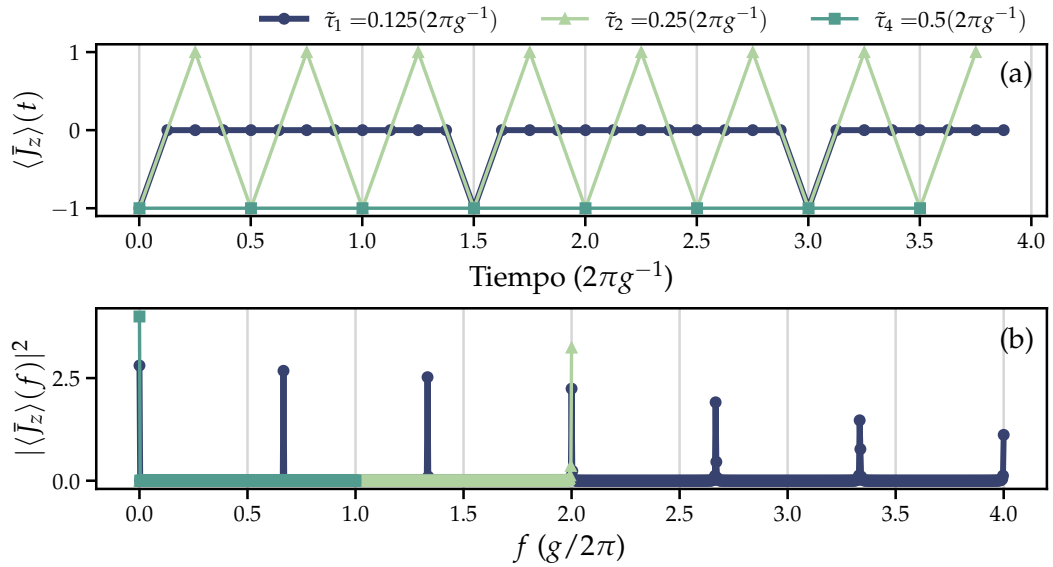


Figura 3.16: **(a)** Dinámica de la magnetización utilizando la trotterización $iz-x$ y parámetros integrables para valores del paso de Trotter correspondientes a las islas $\tilde{\tau}_n = \frac{n}{8}(2\pi g^{-1})$ con $n \in \mathbb{N}$ y **(b)** espectro de frecuencias correspondiente a cada evolución. Cada amplitud fue escalada para mejor visibilidad.

Como mencionamos en la sección 2.3, un aspecto fundamental de una fase de cristal temporal es que se da a lugar un ordenamiento de los autoestados del operador de Floquet de forma tal que sus fases forman grupos en el círculo unitario separados entre sí en un ángulo $2\pi/k$, si $k\tilde{\tau}$ es la periodicidad del cristal, y consecuentemente el espectro de $U^k(\tilde{\tau})$ es compuesto por grupos de fases degeneradas k veces. En la figura 3.17 mostramos que esto sucede en el espectro de la unitaria trotterizada (3.4) para las islas aquí encontradas. A la izquierda mostramos los autovalores del operador de Floquet en el círculo unitario (anillo exterior) y los de su k -ésima potencia (anillo interior), y a la derecha el espectro de Fourier obtenido a partir de la dinámica de la magnetización con una duración de 1000 períodos $\tilde{\tau}$. En cada caso, para dicha dinámica se utilizó $N = 8$ y como estado inicial $|\psi_0\rangle = \otimes_i |\downarrow^{(i)}\rangle$.

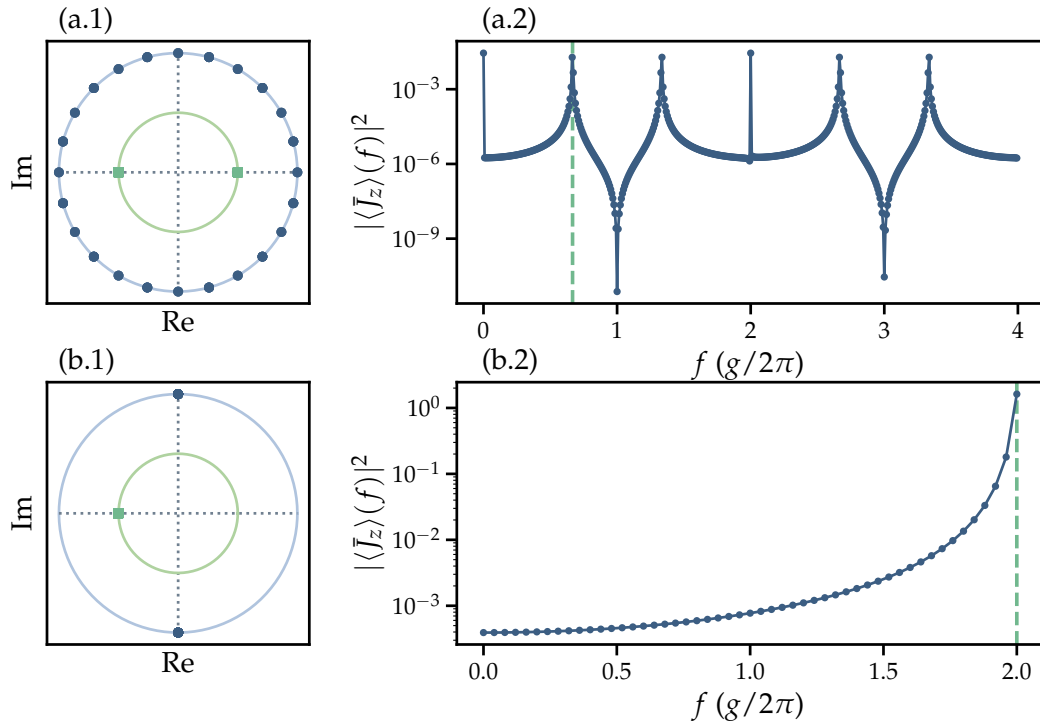


Figura 3.17: Ordenamiento de autoestados (izquierda) de la unitaria trotterizada (3.4) (azul) y de su k -ésima potencia (verde), y respuesta en frecuencias en la dinámica de la magnetización (derecha). La línea vertical se corresponde a la frecuencia dada por $f = 1/k\tilde{\tau}(g/2\pi)$. Se muestran los correspondientes a las islas dadas por $\tilde{\tau} = 1/8(2\pi g^{-1})$, $k = 12$ (a) y por $\tilde{\tau} = 1/4(2\pi g^{-1})$, $k = 2$ (b).

En particular para la isla dada por $n = 1$ (figura 3.17.a) vemos un claro ordenamiento de las fases, de forma tal que se forman 24 grupos degenerados que co-

lapsan en tan solo 2 al elevar el operador de Floquet a la potencia $k = 12$. Correspondientemente, vemos en el espectro de Fourier que el sistema responde de forma subarmónica con una frecuencia $f = \frac{1}{12\tilde{\tau}_1}(g/2\pi) = 2/3(g/2\pi)$. Si tomamos valores de n impar nos ubicamos en islas análogas a ésta, y observamos exactamente el mismo comportamiento. Estas islas son robustas, en la medida en que se tienen para un rango finito del paso de Trotter. Lo análogo observamos para las islas con $n = 2$ (figura 3.17.b), las cuales exhiben una respuesta subarmónica con $f = \frac{1}{2\tilde{\tau}_2}(g/2\pi) = 2(g/2\pi)$.

3.4.2 ISLAS DE LA TROTTERIZACIÓN I-ZX

Con esta trotterización es difícil estimar las posiciones de las islas a simple vista, y a diferencia del caso anterior, no se comparten entre el caso integrable y caótico (ver figuras 3.15.a y 3.15.b). Para entender su origen, escribamos el operador que ejecuta el primer paso en la acción de la unitaria trotterizada (3.3) como $e^{-i\tau(H_z+H_x)} = e^{-i\tau\sum_{i=1}^N \vec{h} \cdot \vec{\sigma}^{(i)}} = \prod_{i=1}^N e^{-i\tau \vec{h} \cdot \vec{\sigma}^{(i)}}$ donde $\vec{h} = (h_x, h_z)$ y $\vec{\sigma}^{(i)} = (\sigma_x^{(i)}, \sigma_z^{(i)})$. Expresando la exponencial del operador en serie de potencias y utilizando la conocida propiedad $(\vec{A} \cdot \vec{\sigma})(\vec{B} \cdot \vec{\sigma}) = \vec{A} \cdot \vec{B} + i(\vec{A} \times \vec{B}) \cdot \vec{\sigma}$, obtenemos

$$e^{-i\tau(H_z+H_x)} = \prod_{i=1}^N (\cos(\tau h) - i \sin(\tau h) \hat{h} \cdot \vec{\sigma}^{(i)}) \quad (3.10)$$

con $h = \sqrt{h_x^2 + h_z^2}$ y $\hat{h} = \vec{h}/h$.

Recordemos que en las islas "principales" de esta trotterización, la cadena se encuentra totalmente polarizada durante toda la evolución, como podemos apreciar en las figuras 3.2.a y 3.5.a, y además, la dinámica es totalmente localizada, como lo indica el PR = $1/D$, con $D = D_{par} = 136$. Por otro lado, el estado inicial utilizado en estas figuras está ambos totalmente polarizado en la dirección $-\hat{z}$, y totalmente localizado en la base de autoestados de S_z (también observamos que, tomando un estado inicial arbitrario, la magnetización en las islas se preserva). El otro operador de la unitaria trotterizada es $e^{-i\tau H_i}$, y depende únicamente de $\sigma_z^{(i)}$, por lo cual si el operador (3.10) actúa trivialmente obtenemos la fenomenología que acabamos de mencionar. Es decir, si $\tau h = n\pi$ con $n \in \mathbb{N}$, obtenemos posiciones para estas islas

$$\tilde{\tau}_n = \frac{n\pi}{\sqrt{h_x^2 + h_z^2}} = \frac{g}{2} \frac{n}{\sqrt{h_x^2 + h_z^2}} (2\pi g^{-1}) \quad (3.11)$$

Con parámetros integrables ($g = 1, h_x = 1$ y $h_z = 3$) obtenemos

$$\tilde{\tau}_n^i = \frac{n}{2\sqrt{10}}(2\pi g^{-1}) \quad (3.12)$$

y con parámetros caóticos ($g = 1, h_x = 1$ y $h_z = 0.5$)

$$\tilde{\tau}_n^c = \frac{n}{\sqrt{5}}(2\pi g^{-1}) \quad (3.13)$$

que son exactamente las posiciones de las islas que buscábamos, como marcamos con las líneas verticales en las figuras 3.15.a y 3.15.b. Notemos que si bien obtuvimos las islas más prominentes, no son todas. Podemos ver tanto en el régimen integrable como en el caótico regiones intermedias donde hay comportamiento cualitativamente similar.

Las islas aquí obtenidas son completamente análogas a aquellas de la trotterización iz-x que también actúan trivialmente ($n = 4k$ para el caso integrable, y $n = 2k$ para el caótico, con $k \in \mathbb{N}$, marcadas con líneas verticales color cian en las figuras 3.15.c y 3.15.d). Sin embargo, en este caso observamos que ante una perturbación en el paso de Trotter $\tau = \tilde{\tau} + \delta\tau$ el sistema muestra, además de la componente constante dominante, una respuesta subarmónica consistente con un cristal temporal de Floquet, aunque imperfecto, para un rango finito de la perturbación $\delta\tau$. Mostramos esto en las figuras 3.18.a y 3.18.b para islas en el régimen integrable y caótico, respectivamente. Para el caso integrable tomamos $\tau = \tilde{\tau}_1^i + \delta\tau$ con $\delta\tau = 0.0025(2\pi g^{-1})$, y para el caótico $\tau = \tilde{\tau}_1^c + \delta\tau$ con $\delta\tau = 0.0018(2\pi g^{-1})$. Como podemos ver en las figuras mencionadas, surge un ordenamiento de autoestados de la unitaria trotterizada de forma tal que en el caso integrable el sistema responde de forma subarmónica con un período 3τ , y en el caso caótico 10τ , aunque tanto la respuesta y el ordenamiento no resultan ser tan limpios como en el caso de los cristales temporales de la trotterización iz-x. Al variar la perturbación $\delta\tau$, en ambos casos observamos que la periodicidad de la respuesta subarmónica no cambia, pero sí varía qué tan bien definido es el cristal. Obtenemos comportamientos análogos en islas para otros valores de n . Al igual que antes, el espectro de Fourier fue obtenido a partir de la dinámica de la magnetización con una duración de 1000 períodos $\tilde{\tau}$, con estado inicial $|\psi_0\rangle = \otimes_i |\downarrow^{(i)}\rangle$. Tanto la dinámica como el espectro de la unitaria trotterizada se obtuvieron con $N = 8$.

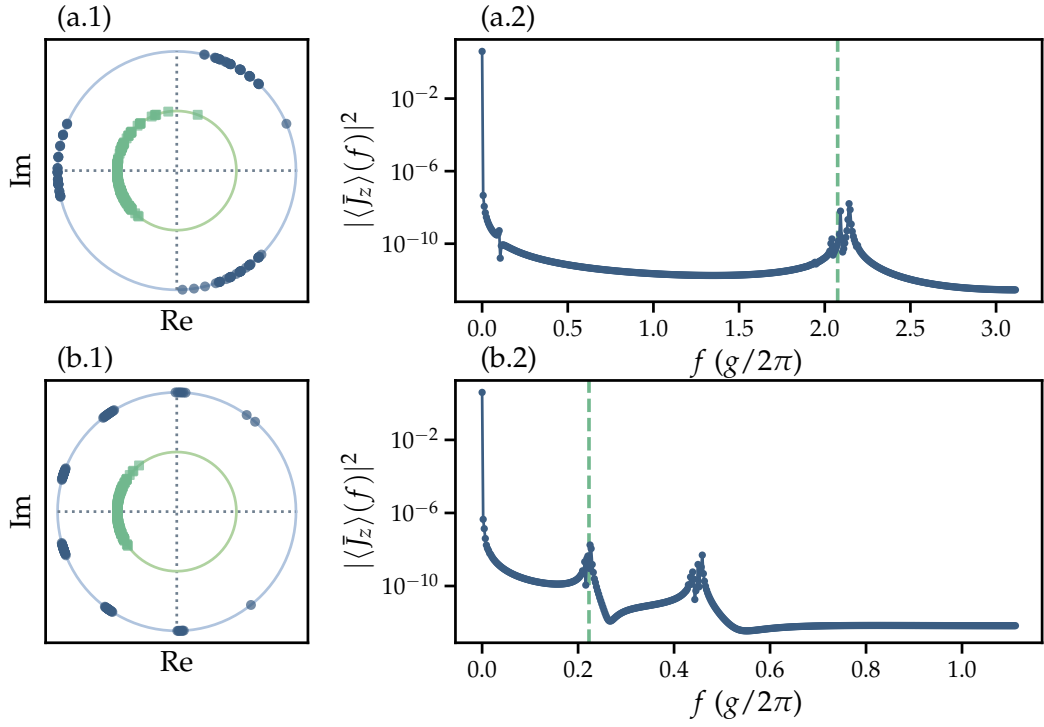


Figura 3.18: Ordenamiento de autoestados (izquierda) de la unitaria trotterizada (3.3) (azul) y de su k -ésima potencia (verde), y respuesta en frecuencias en la dinámica de la magnetización (derecha). La línea vertical se corresponde a la frecuencia dada por $f = 1/k\tilde{\tau}(g/2\pi)$. Se muestran los correspondientes a las islas dadas por **(a)** $\tau = \tilde{\tau}_1^i + \delta\tau$, con $\delta\tau = 0.0025(2\pi g^{-1})$ y $k = 3$ (con parámetros integrables) y por **(b)** $\tau = \tilde{\tau}_1^c + \delta\tau$, con $\delta\tau = 0.0018(2\pi g^{-1})$ y $k = 10$ (con parámetros caóticos).

3.4.3 ISLAS DE LA TROTTERIZACIÓN IX-Z

Para esta trotterización la mayoría de las islas parecen tener posiciones identificables a simple vista: $\tilde{\tau}_n^i = n/6(2\pi g^{-1})$ con parámetros integrables y $\tilde{\tau}_n^c = n/2(2\pi g^{-1})$ con caóticos, como mostramos en las figuras 3.15.e y 3.15.f. Sin embargo, también es visible que estas no son perfectas, pareciéndose a lo que sucede con el modelo de Ising A2A (ver figura 2.2). Una inspección analítica del origen de las islas para esta trotterización queda pendiente, pero sugerimos que la forma funcional de la unitaria es tal que sucede algo similar que en los casos anteriores, pero de forma aproximada.

Como muestra la figura 3.19, en este caso también observamos comportamiento de tipo cristal temporal, en la medida en que existen respuestas subarmónicas con un período múltiplo del paso de Trotter, aunque no necesariamente es obvio obser-

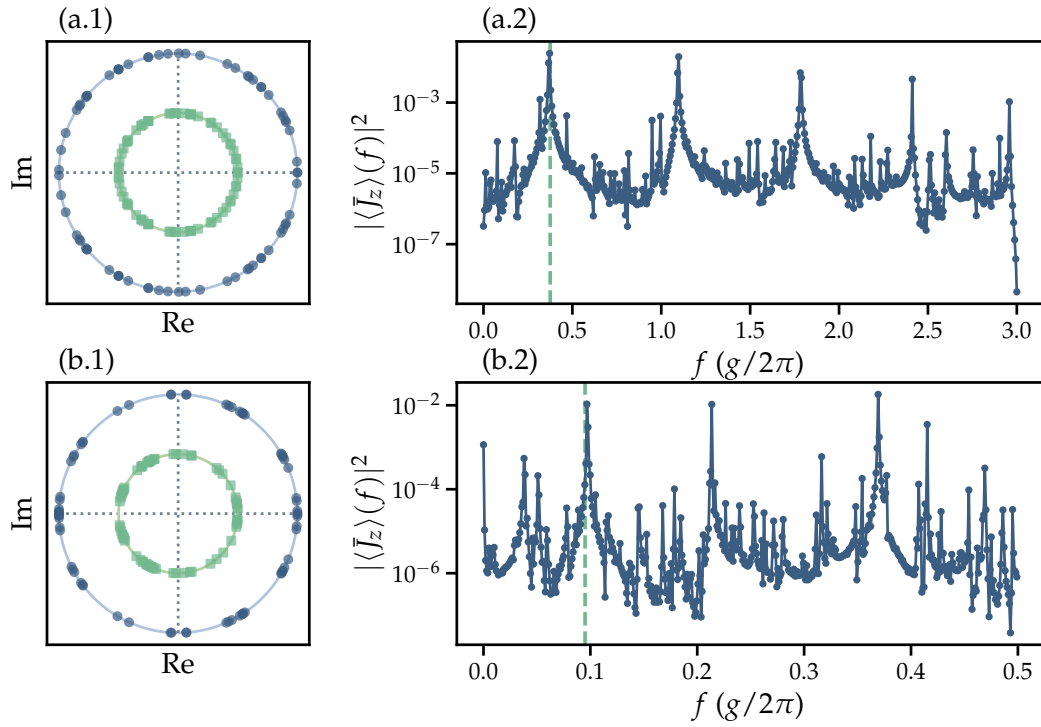


Figura 3.19: Ordenamiento de autoestados (izquierda) de la unitaria trotterizada (3.5) (azul) y de su k -ésima potencia (verde), y respuesta en frecuencias en la dinámica de la magnetización (derecha). La línea vertical se corresponde a la frecuencia dada por $f = 1/k\tilde{\tau}(g/2\pi)$. Se muestran los correspondientes a las islas dadas por **(a)** $\tilde{\tau} = 1/6(2\pi g^{-1})$, $k = 16$ (con parámetros integrables) y por **(b)** $\tilde{\tau} = 1/(2\pi g^{-1})$, $k = 21$ (con parámetros caóticos).

vando el espectro del operador de Floquet o el de su potencia. En el caso integrable (figura 3.19.a) es visible algún tipo de ordenamiento de los autovalores de la unitaria, pero no es sencillo identificar una periodicidad definida, lo mismo se puede decir para el de su k -ésima potencia. Aquí tomamos $\tau = \tilde{\tau}_1^i$, y $k = 16$. En cuanto a la respuesta del sistema, vemos que existe al menos una componente subarmónica con período $\approx 16\tilde{\tau}_1^i$, pero también hay otras de amplitud menor que no necesariamente son múltiplos enteros. Ésta respuesta también está presente en las otras islas que se obtienen al variar n , y en cada una, existen en un intervalo finito del paso de Trotter. Con parámetros caóticos existe un ordenamiento más aparente, y también vemos una respuesta subarmónica. En la figura 3.19.b lo mostramos para $\tau = \tilde{\tau}_2^c$, y la potencia de la unitaria es $k = 21$. Aquí también vemos que hay respuestas en otras frecuencias, y de amplitud del mismo orden que la subarmónica con período $\approx 21\tilde{\tau}_2^c$. Al igual que con el caso anterior, ésta respuesta está también presente en

islas con otro valor de n , y cada una sobrevive ante una variación finita del paso de Trotter. En este caso obtuvimos los resultados con $N = 7$, para que haya menor densidad de fases en el círculo unitario y sea más fácil inspeccionarlo, y al igual que antes el espectro de Fourier proviene de la dinámica de la magnetización con condición inicial $|\psi_0\rangle = \otimes_i |\downarrow^{(i)}\rangle$ y una duración de 1000 períodos $\tilde{\tau}$.

Cabe mencionar que incluso en una fase de cristal temporal estricta, no necesariamente será fácil detectarla inspeccionando visualmente el espectro del operador de Floquet en el círculo unitario. En el ejemplo que vimos en la sección 2.3 tenemos que el espectro se ordena en pares separados por un ángulo π , por lo que el sistema mostrará una respuesta subarmónica clara de período 2τ . Sin embargo, como cada par posee una fase distinta a la de los demás pares, la organización del total de las fases en el círculo unitario puede parecer arbitraria. Por otro lado, también es posible la convivencia de varias respuestas subarmónicas con distinta periodicidad, que también dificultaría la visibilidad del ordenamiento. Para lo visto con esta trotterización sugerimos que lo que estamos observando es una fase de cristal temporal aproximada, por lo que el ordenamiento de autoestados no será perfecto y la respuesta del sistema no será exactamente un múltiplo del paso de Trotter. Para probar esta hipótesis haría falta un análisis riguroso de la unitaria trotterizada (3.5), que dejamos pendiente.

Resumen y observaciones

En esta sección estudiamos las posiciones y el comportamiento del sistema en las "islas de estabilidad" encontradas para las distintas trotterizaciones del modelo de Ising con campo transverso-longitudinal. Para detectarlas nos guiamos principalmente por el comportamiento de la localización, en particular mediante la observación de que decrece considerablemente o se minimiza. En todos los casos, vimos que **en las islas el sistema muestra comportamiento de tipo cristal temporal**, de forma exacta para la trotterización iz-x, y aproximada en las trotterizaciones i-zx e ix-z, según lo indican el ordenamiento de autoestados de la unitaria trotterizada y la respuesta subarmónica del sistema.

4 CONCLUSIONES

En esta tesis se estudiaron varios aspectos de la relación entre el rendimiento de la simulación digital de sistemas cuánticos mediante trotterización y la caoticidad de los mismos. En particular, el interés se centró en la interpretación para la proliferación de sus errores que adjudica al caos cuántico como su mecanismo fundamental, sirviéndose como ejemplo el caos del kicked top, pues la misma deja varios aspectos sin considerar; como la existencia de un threshold en una transición al caos y la proliferación de errores en sistemas que ya son caótico cuánticos sin ser trotterizados. Para realizar el estudio, se implementaron computacionalmente los distintos sistemas considerados, y para cada uno se simuló la dinámica trotterizada de distintas medidas en función del paso de Trotter con varios esquemas de trotterización. Al mismo tiempo, se utilizaron las medidas espectrales usuales para realizar un diagnóstico conclusivo de la presencia de caos cuántico. El análisis fue luego expandido al considerar un conjunto representativo de posibles estados iniciales para la dinámica. Por último, se investigó el origen de ciertas regiones en función del paso de Trotter donde la simulación mostraba rendimiento mejorado, llamadas islas de estabilidad.

Los resultados de este estudio indican una falta de relación causal estricta entre la proliferación de errores de Trotter y el desarrollo de caos cuántico en la dinámica trotterizada, y que incluso existen conjuntos de sistemas y trotterizaciones donde no sucede una transición al caos. En particular, se mostró la existencia de sistemas integrables que no transicionan a caos en función del paso de Trotter pero que sus errores sí proliferan, y sistemas que son caóticos previamente a la trotterización donde también los errores aumentan significativamente. Al extender este estudio a estados iniciales arbitrarios, se mostró que el threshold no es una característica fundamental de la dinámica trotterizada, y que no está estrictamente correlacionada con una transición al caos, sino que es ampliamente dependiente del estado considerado. Para un estado inicial arbitrario, la transición en la que proliferan los errores será suave. Sin embargo, la existencia de dicha transición sí se hace evidente en la pérdida de una descripción analítica de los mismos en función del paso de Trotter,

lo cual indica que los errores se vuelven no controlables. Los resultados concuerdan en la universalidad de las características presentes en la dinámica simulada en función del paso de Trotter, en cuanto que existen tres regímenes claros y que se comparten para todos los modelos y trotterizaciones consideradas: i. fidelidad de simulación alta y crecimiento aproximadamente lineal del error en los observables locales, ii. decaimiento de la fidelidad y saturación del error, dentro de una región donde la dinámica muestra cuasiperiodicidad y iii. fidelidad prácticamente nula y errores no controlables. Por último, se relacionaron las islas de estabilidad con regiones en función del paso de Trotter donde el sistema trotterizado responde dando a lugar a una fase de cristal temporal de Floquet. En algunos casos el sistema se comporta estrictamente como un cristal, mientras que en otros de forma aproximada. También se concluyó que, para un estado inicial arbitrario, estas islas no necesariamente implican un aumento significativo en la fidelidad de la simulación trotterizada, pues la dinámica resultante en las mismas puede desviarse arbitrariamente de la ideal.

Los resultados de esta tesis muestran que el desarrollo de caos cuántico no es el mecanismo fundamental para la proliferación de los errores de Trotter. Si bien es posible que no exista un mecanismo fundamental, sino que la validez de la expansión de Trotter-Suzuki tenga que ser analizada caso a caso, una dirección prometedora es investigar la conservación de la energía. Algunos de los resultados de la tesis fueron interpretados en función del hecho de que la equivalencia entre trotterizar la evolución de un sistema y forzarlo periódicamente romperá con la conservación de la energía del hamiltoniano independiente del tiempo que se desea simular, para valores del paso de Trotter lo suficientemente grandes. Esto puede o no dar lugar a caos cuántico dependiendo de otras características que definen la integrabilidad de un sistema, como el número de cantidades conservadas. Tal interpretación es compatible con la expresión a nivel del hamiltoniano para los errores de Trotter dada por la expansión de Magnus (2.9). En efecto, para valores lo suficientemente pequeños del paso de Trotter dicha expansión converge y la dinámica generada por la trotterización puede ser descrita mediante un hamiltoniano local y estático [14, 16], lo cual es compatible con el sistema que se quiere simular. La divergencia de la expansión para valores lo suficientemente grandes de τ está estrechamente relacionada con la capacidad del sistema de absorber energía del forzado [14, 16, 28], incluso en sistemas integrables [29]. Físicamente, la divergencia de la expansión de Magnus y la correspondiente absorción de energía

se pueden entender a partir de resonancias [30] cuando la frecuencia del forzado $\omega = 2\pi/\tau$ es del mismo orden que las escalas de energía típicas del sistema.

Más allá del mecanismo para la proliferación de errores de Trotter, reconocemos al menos dos aspectos adicionales que podrían dar a lugar a resultados interesantes. En primer lugar, y en la línea de la conservación de la energía, sería investigar la simulación cuántica digital de sistemas dependientes del tiempo. En segundo lugar, a pesar de que destacamos que la disminución de errores de Trotter en las islas de estabilidad no es significativo para una condición inicial arbitraria, podría ser fructífero investigar la posibilidad de aprovechar la dinámica regular que se da en éstas regiones para obtener una expresión analítica de los errores de Trotter y en base a la misma aplicar alguna forma de corrección de errores, y así reducirlos a niveles de tolerancia aceptables para valores relativamente altos del paso de Trotter. Esto podría resultar beneficioso si se lo puede lograr aunque sea para un subconjunto de condiciones iniciales experimentalmente relevantes.

Apéndices

A MEDIDAS DINÁMICAS

En este apéndice definimos las medidas que utilizamos para detectar una transición en la dinámica trotterizada de los sistemas explorados. Para cada uno, estudiamos la evolución temporal de valores de expectación, la localización del estado y medidas de error entre la evolución ideal del sistema y su simulación trotterizada, en función del paso de Trotter.

En esta tesis utilizamos modelos de espines, por lo que los valores de expectación de observables que estudiamos fueron la magnetización

$$\langle \bar{J}_z \rangle = \frac{2}{N} \sum_{i=1}^N \langle S_z^{(i)} \rangle \quad (\text{A.1})$$

de forma tal que vale 1 ó -1 si la cadena está completamente polarizada en las direcciones \hat{z} y $-\hat{z}$ respectivamente; y para sistemas que preservan la magnetización optamos por utilizar la polarización de algún espín en la cadena $\langle \sigma_z^{(i)} \rangle$ siendo i el número de sitio.

Un sistema caótico cuántico evoluciona hacia estados deslocalizados. Para cuantificar este aspecto de la dinámica utilizamos el *inverse participation ratio* (IPR). Dada una base de estados $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^D$ y un estado $|\psi\rangle$, se define como la suma cuadrática de las proyecciones del estado $|\psi\rangle$ sobre los elementos de la base:

$$\text{IPR} = \sum_{i=1}^D p_i^2 = \sum_{i=1}^D |\langle \phi_i | \psi \rangle|^4 \quad (\text{A.2})$$

Para un estado distribuido uniformemente a lo largo de toda la base (completamente deslocalizado) resulta $\text{IPR}(|\psi_{deloc}\rangle) = 1/D$, mientras que si coincide con alguno del conjunto (completamente localizado) toma el valor $\text{IPR}(|\psi_{loc}\rangle) = 1$. También hicimos uso de una variante de esta cantidad basada en su inversa normalizada $\text{PR} := \text{IPR}^{-1} / D$, a partir de la cual estudiamos la localización en función

del tiempo de un estado $|\psi(t)\rangle$ evolucionado con respecto a alguna base $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^D$ mediante

$$\text{PR}(t) := \frac{1}{D} \left(\sum_{i=1}^D |\langle \phi_i | \psi(t) \rangle|^4 \right)^{-1} \quad (\text{A.3})$$

Notemos que debido a la normalización introducida el PR toma valores $\text{PR}(t) = 1$ si $|\psi(t)\rangle$ se encuentra totalmente deslocalizado, y $\text{PR}(t) = 1/D$ si está totalmente localizado en la base elegida. Para detectar la deslocalización que produce la dinámica caótica cuántica es importante elegir una base y estado inicial de forma tal que éste se encuentre localizado en el inicio de la evolución. En las simulaciones de la dinámica de sistemas realizadas en esta tesis utilizamos siempre estados de la forma $|\psi_0\rangle = |m_1 \dots m_N\rangle$ como condición inicial, siendo $m_i = \pm 1$ tal que $\sigma_z^{(i)} |m_1 \dots m_i \dots m_N\rangle = m_i |m_1 \dots m_i \dots m_N\rangle$. Éstos son autoestados del operador de espín total colectivo en la dirección \hat{z} , $S_z = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_z^{(i)}$, por lo que se encuentran localizados en su base, y es la que utilizamos.

Para cuantificar la desviación entre la dinámica trotterizada y la dinámica sin aproximar (ideal) del sistema utilizamos dos medidas distintas de error. La primera de ellas es la fidelidad de simulación, dada por la proyección tiempo a tiempo del estado evolucionado por el operador de evolución ideal sobre el estado evolucionado por la unitaria trotterizada

$$\mathcal{F}(\psi_{\text{trot}}(t), \psi_{\text{ide}}(t)) = |\langle \psi_{\text{trot}}(t) | \psi_{\text{ide}}(t) \rangle|^2 \quad (\text{A.4})$$

Ésta es una medida directa del error en la dinámica a través del estado del sistema, y por lo tanto da una noción general del rendimiento que se puede esperar de la simulación trotterizada, independientemente de los observables que se quieran estudiar. Por otro lado, estudiamos el error en la dinámica de observables locales usando como referencia el error tiempo a tiempo en la magnetización (A.1), definido como

$$\Delta \bar{J}_z = |\langle \bar{J}_z^{\text{ide}} \rangle - \langle \bar{J}_z^{\text{trot}} \rangle| \quad (\text{A.5})$$

y para sistemas que preservan la magnetización, el error tiempo a tiempo de la polarización del espín i -ésimo

$$\Delta \sigma_z^{(i)} = |\langle \sigma_z^{(i), \text{ide}} \rangle - \langle \sigma_z^{(i), \text{trot}} \rangle| \quad (\text{A.6})$$

B MEDIDAS ESPECTRALES DE CAOS CUÁNTICO

La dinámica de un sistema caótico cuántico puede ser entendida a partir de las características que comparten el espectro de su hamiltoniano y el de matrices aleatorias, a nivel estadístico. Es por eso que comparar las propiedades estadísticas de un sistema con las de distintos tipos de matrices aleatorias es una herramienta poderosa para diagnosticar la presencia de caos en un sistema cuántico. En este apéndice daremos un resumen breve de las relaciones entre el caos cuántico y la teoría de matrices aleatorias, y cómo las utilizamos en esta tesis.

En una matriz aleatoria, todas sus componentes son variables aleatorias provenientes de alguna distribución, y el estudio de las propiedades estadísticas de estas matrices, principalmente de sus autovalores y autovectores, es lo que se conoce como teoría de matrices aleatorias (RMT) [31]. Las matrices aleatorias que resultan físicamente relevantes pertenecen a alguna de tres clases de universalidad en función de sus simetrías [32], y son el ensamble unitario, el ensamble ortogonal y el ensamble simpléctico, que reciben sus nombres a partir de que las distribuciones de probabilidad que los describen son invariantes ante conjugación unitaria, ortogonal y simpléctica, respectivamente. Físicamente, el ensamble unitario modela la estadística de sistemas sin simetría de inversión temporal, el ensamble ortogonal sistemas con simetría de inversión temporal y el ensamble simpléctico sistemas con simetría de inversión temporal, pero sin simetría de rotación [21, 31]. Las matrices aleatorias también se clasifican según si son hermíticas o unitarias, y en el primer caso se dice que pertenecen al ensamble gaussiano (G), y en el segundo al ensamble circular (C). En total, una matriz aleatoria puede pertenecer a los ensambles COE/GOE (ortogonales), CUE/GUE (unitarias) y CSE/GSE (simplécticas).

B.1 ESTADÍSTICA DE AUTOVALORES

Muchos trabajos han encontrado relaciones entre la estadística de niveles proveniente de hamiltonianos que modelan sistemas que son caóticos en el límite clásico y la estadística de autovalores que poseen las matrices aleatorias expuestas anteriormente [13, 33–35], culminando en las conjeturas de Bohigas-Giannoni-Schmit (conjetura BGS) y de Berry-Tabor. La primera propone que sistemas cuánticos que exhiben caos en el límite clásico son tales que el comportamiento local de su estadística de niveles en una *secuencia simple* es indistinguible al proveniente de una matriz aleatoria [31, 36], donde una secuencia simple se refiere a los niveles con el mismo espín, paridad, y cualquier otra conservación estricta del sistema. Luego, la estadística de espaciado de niveles respetaría una distribución de Wigner-Dyson, cuya expresión es

$$P(s) = A_\beta s^\beta e^{-B_\beta s^2} \quad (\text{B.1})$$

donde s es el espaciado entre niveles consecutivos y β es el parámetro de Dyson, e indica qué ensamble de matrices aleatorias describe la distribución, y vale $\beta = 1$ para COE/GOE, $\beta = 2$ para CUE/GUE, y $\beta = 4$ para CSE/GSE, y A_β y B_β son coeficientes que dependen de este parámetro. Por otro lado, la segunda conjetura sugiere que en sistemas cuánticos con límite clásico integrable dicha estadística es compatible con una distribución de Poisson [37]. Es importante mencionar que existen contraejemplos para ambas conjeturas [38–40], y que no siempre queda claro cómo interpretar dicha estadística en sistemas cuánticos sin un límite clásico. Aún así, el espaciado de niveles es una herramienta poderosa y ampliamente utilizada para diagnosticar la presencia de caos en un sistema cuántico.

Para hacer uso de la conjetura BGS, es necesario calcular la distribución de espaciado de niveles del sistema en cuestión y compararla con la de Wigner-Dyson (B.1). Una complicación de este procedimiento es que la distribución $P(s)$ describe los niveles de energía de un sistema real *localmente*, es decir, en un pequeño rango local de energías y habiendo normalizado la densidad media de niveles. Esto se logra mediante un proceso llamado *unfolding* [31, 41], que es difícil de implementar para un sistema de muchos cuerpos debido a que la dimensión del espacio de Hilbert aumenta exponencialmente con el número de partículas. Es por eso que

en esta tesis utilizamos una cantidad relacionada que evita esta complejidad [42] definida como

$$\langle \tilde{r} \rangle = \frac{1}{D} \sum_{n=1}^D \tilde{r}_n \quad \text{donde} \quad \tilde{r}_n = \frac{\min(s_n, s_{n-1})}{\max(s_n, s_{n-1})} = \min\left(r_n, \frac{1}{r_n}\right) \quad (\text{B.2})$$

siendo $s_n = e_{n+1} - e_n$ el espaciado entre autovalores consecutivos de un operador hermítico ó $s_n = \theta_{n+1} - \theta_n$ el espaciado de fases de un operador unitario, $r_n = s_n/s_{n-1}$, y D el tamaño del espacio de Hilbert. Los valores que toma esta cantidad para las varias estadísticas mencionadas del espaciado de niveles se encuentran tabulados [43], y son

- Poisson: $\langle \tilde{r} \rangle = 2 \ln(2) - 1 \approx 0.38629$
- GOE: $\langle \tilde{r} \rangle = 4 - 2\sqrt{3} \approx 0.53590$
- GUE: $\langle \tilde{r} \rangle = 2\frac{\sqrt{3}}{\pi} - \frac{1}{2} \approx 0.60266$
- GSE: $\langle \tilde{r} \rangle = \frac{32}{15}\frac{\sqrt{3}}{\pi} - \frac{1}{2} \approx 0.67617$

En esta tesis utilizamos la cantidad propuesta calculándola para el sistema en cuestión y comparando su valor con aquellos correspondientes a las distintas clases de universalidad.

B.2 ESTADÍSTICA DE AUTOVECTORES

También se ha utilizado con éxito la estadística de autovectores de matrices aleatorias para describir las propiedades de sistemas caótico cuánticos [21, 35, 44]. Una ventaja de esta alternativa es que sus distribuciones se obtienen de forma exacta para cualquier dimensión del sistema, a diferencia de las asociadas al espaciado de niveles [31, 45, 46].

Los resultados de la estadística de autovectores de matrices aleatorias relevantes para esta tesis son los siguientes. Sea $\{|\psi_i\rangle\}_{i=1}^D$ el conjunto de autovectores provenientes de una matriz aleatoria, éstos en sí mismos son también matrices aleatorias, y al expandirlos en alguna otra base $\{|\phi_j\rangle\}_{j=1}^D$ obtenemos los coeficientes de la expansión $|\psi_i\rangle = \sum_{j=1}^D c_{ij}|\phi_j\rangle$ que cumplen la normalización $\sum_{i=1}^D |c_{ij}|^2 = 1$. Luego, la

variable aleatoria $\eta := |c_{ij}|^2$ proviene de distintas distribuciones, en función de la clase de universalidad a la que pertenece la matriz aleatoria [21, 35, 44], dadas por

$$P_{\text{COE}/\text{GOE}}(\eta) = \frac{\Gamma(\frac{D}{2})}{\Gamma(\frac{D-1}{2})} \frac{1}{\sqrt{\pi\eta}} (1-\eta)^{\frac{D-3}{2}} \quad (\text{B.3})$$

$$P_{\text{CUE}/\text{GUE}}(\eta) = (D-1)(1-\eta)^{D-2} \quad (\text{B.4})$$

$$P_{\text{CSE}/\text{GSE}}(\eta) = (D-1)(D-2)\eta(1-\eta)^{D-1} \quad (\text{B.5})$$

siendo $\Gamma(z)$ la función Gamma o factorial generalizado. Notemos que las distribuciones no dependen de si la matriz aleatoria es unitaria o hermítica.

El resultado depende de la base de referencia elegida $\{|\phi_j\rangle\}$, y por lo tanto hay que tomar en cuenta algunas sutilezas que surgen de su elección. Esto es debido a que una base $\{|\psi_i\rangle\}$ que no proviene de una matriz aleatoria resultará en una distribución de η en acuerdo con las distribuciones anteriores, si es que la base de referencia es aleatoria, y en general una base arbitraria va a serlo. Por lo tanto, ésta base tiene que ser elegida de forma tal que la estadística resultante se corresponda con alguna de las clases de universalidad sí y sólo sí la base $\{|\psi_i\rangle\}$ proviene de una matriz aleatoria. En términos físicos, al obtener el conjunto de autoestados de un hamiltoniano u operador de evolución, se debe elegir una base de referencia de forma tal que su estadística de autovectores se corresponda con alguna de las clases de universalidad sí y sólo sí el sistema en cuestión es caótico. Esto se puede lograr utilizando como base de referencia los autoestados provenientes de un sistema integrable, que es el método que utilizamos en esta tesis.

Para comparar la estadística de autoestados de los sistemas estudiados con aquella descrita por las distribuciones presentadas utilizamos un test de Kolmogorov-Smirnov, el cual es un test no paramétrico que compara la distribución acumulativa empírica obtenida con la proveniente de alguna distribución de probabilidad de referencia. En este caso, obtenemos una muestra de coeficientes $\{\eta_i\}_{i=1}^n$ (típicamente $n = D^2$ con D la dimensión del Hilbert) y con ellos construimos la distribución acumulativa empírica $F_n(\eta)$ [47] de la siguiente forma

$$F_n(\eta) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n 1_{[0,\eta]}(\eta_i) \quad (\text{B.6})$$

donde $1_{[0,\eta]}$ es la función indicador, que toma valores 1 si $\eta_i \leq \eta$ y 0 en cualquier otro caso. Las distribuciones de referencia serán las distribuciones cumulativas correspondientes a las clases de universalidad (B.3), (B.4) y (B.5) que denominamos $F_{RMT}(\eta)$ con RMT indicando alguno de los ensambles GOE , GUE o GSE si la estadística proviene de un operador hermítico, y COE , CUE o CSE si proviene de uno unitario. Definimos el estadístico de Kolmogorov-Smirnov comparando respecto al ensamble RMT como

$$t_{RMT}^{KS} := \sup_{\eta} |F_n(\eta) - F_{RMT}(\eta)| \quad (\text{B.7})$$

es decir, es el supremo de las diferencias entre la distribución empírica y la de referencia. La ventaja de utilizar este estadístico, en comparación con un test χ^2 por ejemplo, es que no depende del bineado de un histograma, operando directamente con los datos. Por otro lado, la distribución que respeta el estadístico t_{RMT}^{KS} es independiente de la distribución de referencia RMT bajo la hipótesis nula de que la muestra efectivamente proviene de la misma [47]. Es por este motivo que no hace falta normalizar el estadístico, ni compararlo con valores tabulados para las distintas distribuciones de referencia, como hacemos con $\langle \tilde{r} \rangle$. Mientras menor sea el valor de t_{RMT}^{KS} , mejor se corresponde la muestra con la distribución de referencia. En la práctica observamos, para los tamaños de muestras provenientes del espectro de sistemas físicos utilizados en esta tesis, que un valor de $t_{RMT}^{KS} \approx 0.0015$ indica buen acuerdo con la distribución de referencia.

C RESULTADOS ADICIONALES

En este apéndice mostramos resultados adicionales que son análogos o consideramos útiles para brindar contexto a aquellos en el cuerpo principal de la tesis, pero que no necesariamente aportan tan significativamente a las conclusiones obtenidas.

C.1 TROTTERIZACIONES IZ-X E IX-Z

En la sección 3.1 definimos tres trotterizaciones distintas para el modelo de Ising con campo magnético transverso-longitudinal, que denominamos i-zx, iz-x e ix-z. En este apéndice mostraremos los resultados para las dos últimas.

Al igual que con la trotterización i-zx, analizamos la dinámica, los errores y el espectro de la unitaria en función del paso de Trotter, tanto en el régimen integrable como caótico. El estado inicial es $|\psi_0\rangle = \otimes_i |\downarrow^{(i)}\rangle$, y todas las simulaciones se hicieron habiendo reducido el hamiltoniano al subespacio de paridad positiva, con $N = 8$.

TROTTERIZACIÓN IZ-X

Las figuras C.1 y C.2 muestran la dinámica de la magnetización y la localización, y las medidas de error, respectivamente, con parámetros integrables en el límite de paso de Trotter pequeño. En este caso, a diferencia de la trotterización i-zx, el sistema sí sufre una transición tal que el estado es deslocalizado y la cadena se desmagnetiza. También vemos la presencia de islas, respecto a las cuales notemos que existen algunas tales que la cadena no queda totalmente polarizada durante toda la evolución, sino que oscila. Los errores proliferan de una manera similar a la trotterización originalmente considerada, aunque con menos fluctuaciones debido a las islas, logran estacionarse. Notemos que en aquellas previamente mencionadas el error en la evolución del observable es indistinguible de aquél fuera de una isla, mientras que sí hay un aumento en la fidelidad del estado. El comportamiento del sistema en éstas islas lo describimos en la sección 3.4. Notemos también la presencia de los "picos" en la región de transición, que estaban presentes también en el

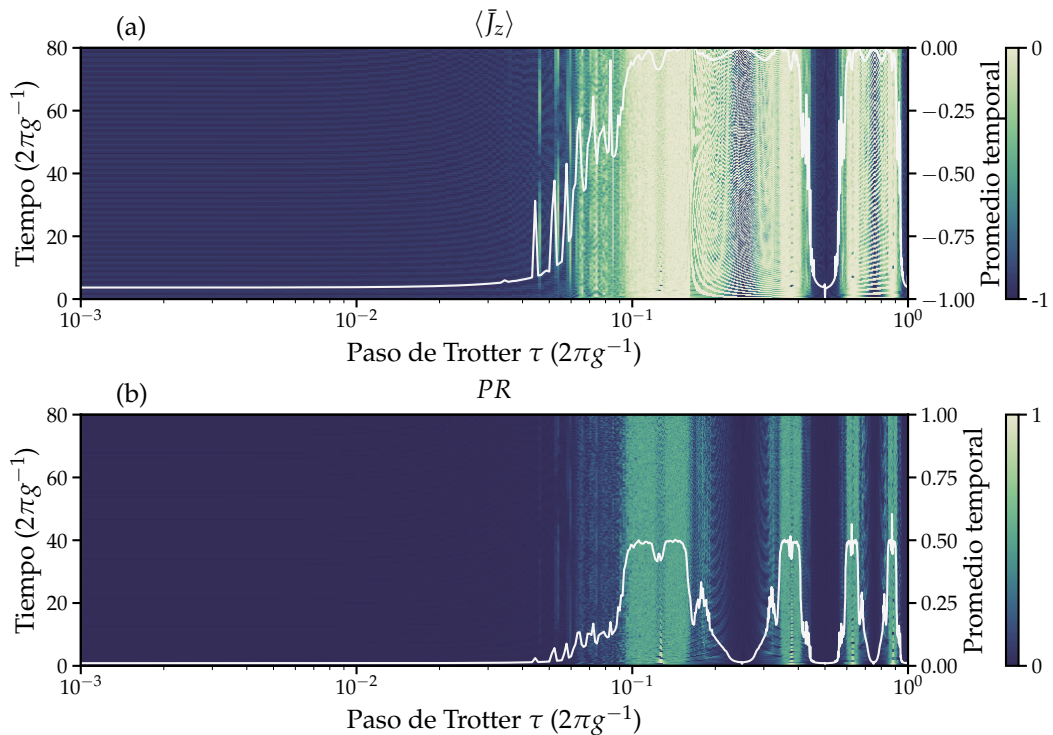


Figura C.1: Dinámica del sistema en función del paso de Trotter con parámetros integrables y utilizando la trotterización $i-z-x$ (3.4). **(a)** Magnetización. **(b)** Localización del estado evolucionado.

régimen integrable del caso $i-zx$. La estadística espectral en función del paso de Trotter con parámetros integrables, que mostramos en la figura C.3, muestra una transición a caos cuántico de forma similar a como sucedía para el modelo de Ising A2A (figura 2.4). Al igual que en aquél caso, ésta transición se correlaciona con la proliferación de errores. Notemos que debido a la menor densidad y número de islas para esta trotterización, éstas se definen claramente en las medidas espectrales. Por último, notemos que la estadística de autovectores de la unitaria trotterizada converge al ensamble unitario, indicando pérdida de simetría de inversión temporal. Para la trotterización $i-zx$ esto sucedía sólo con parámetros caóticos (figura 3.7).

Los resultados de la trotterización $i-z-x$ para parámetros donde el sistema ya es caótico en el límite de paso de Trotter pequeño son ampliamente análogos a aquellos para la $i-zx$ que mostramos en el cuerpo principal de la tesis, y se pueden hacer las mismas observaciones. Éstos resultados se encuentran en las figuras C.4 y C.5 para la dinámica, y la figura C.6 para la estadística del espectro en función del paso

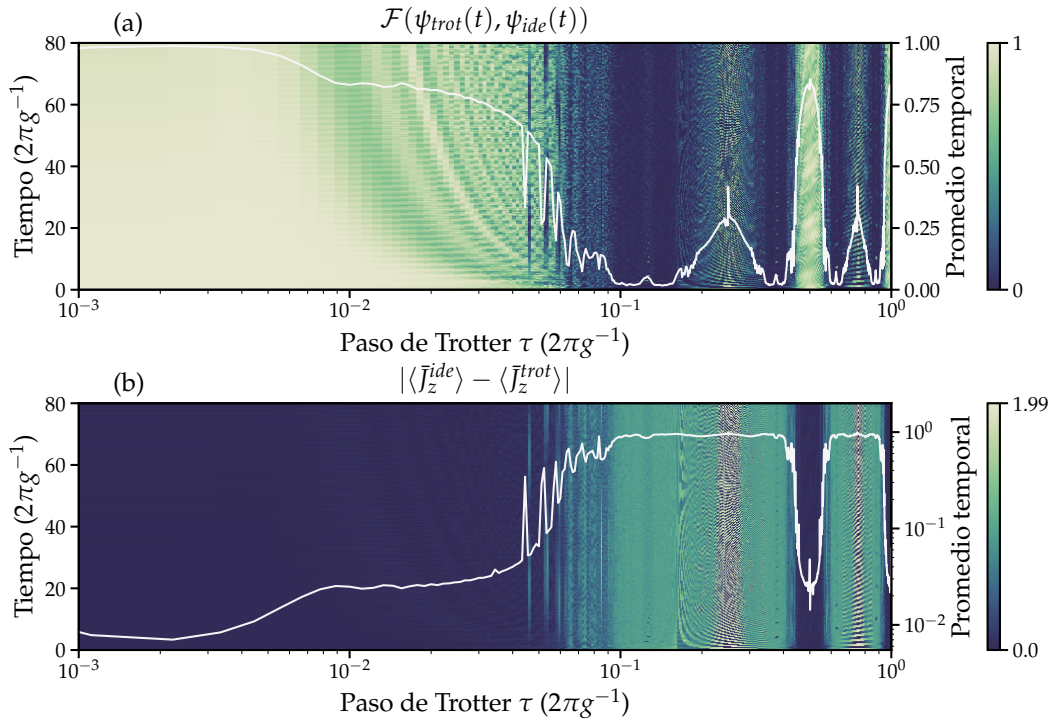


Figura C.2: Error en la dinámica del sistema en función del paso de Trotter con parámetros integrables y utilizando la trotterización iz-x (3.4), cuantificado mediante la (a) fidelidad de simulación y el (b) error en la magnetización.

de Trotter. Sin embargo, un aspecto a destacar es que para esta trotterización ambos regímenes, integrables y caóticos, comparten la mayoría de las islas que poseen, lo cual describimos en la sección 3.4. Por último, notemos que al igual que en el caso caótico de la trotterización i-zx, aquí no hay una transición al caos la cual correlacionar con la proliferación de errores, pues el sistema es caótico para todo valor del paso de Trotter.

TROTTERIZACIÓN IX-Z

La dinámica y errores en régimen integrable de esta trotterización se encuentran en las figuras C.7 y C.8, respectivamente. La estadística del espectro en este régimen se encuentra en la figura C.9. Para el caso caótico, las figuras C.10 y C.11 contienen la dinámica y errores, respectivamente. Por último, la figura C.12 muestra la caoticidad en función del paso de Trotter. En términos generales, todas las observaciones que se pueden hacer sobre esta trotterización ya se encuentran presentes en las hechas para las trotterizaciones i-zx e iz-x.

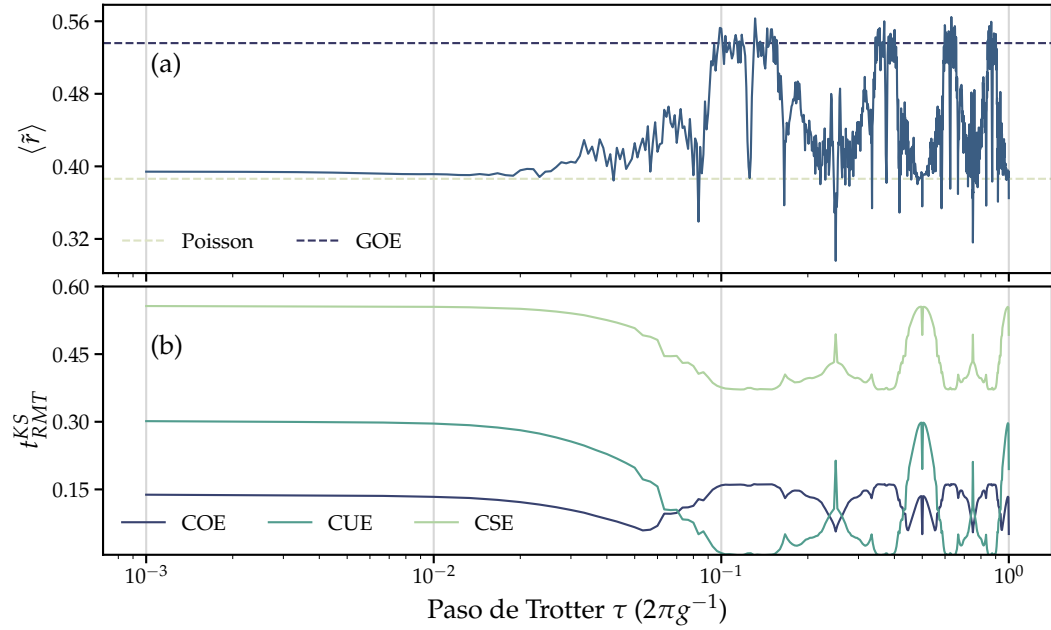


Figura C.3: Caoticidad del sistema en función del paso de Trotter con parámetros integrables y utilizando la trotterización iz-x (3.4), según (a) el promedio del cociente de espaciado de fases y (b) un test de Kolmogorov-Smirnov comparando la estadística de autoestados de la unitaria trotterizada, respecto a la base de autoestados del hamiltoniano desacoplado ($g = 0$), con las distribuciones de cada ensamble.

C.2 DEPENDENCIA CON EL ESTADO INICIAL: IX-Z

En la sección 3.2 mostramos la dependencia de los resultados obtenidos en la sección 3.1 con la elección de estado inicial. Aquí haremos lo mismo pero con la trotterización ix-z (3.5), cuyos resultados para el estado inicial considerado originalmente $|\psi_0\rangle = \otimes_i |\downarrow^{(i)}\rangle$ se encuentran en el apéndice C.1.

Al igual que con los resultados mostrados en el cuerpo principal de la tesis para la trotterización i-zx, consideramos la mitad de los autoestados del operador de espín total colectivo S_z con paridad definida positiva y tomados uniformemente, para un total de 69 estados iniciales. En las figuras C.13 y C.14 se encuentran los resultados para esta trotterización, con parámetros integrables y caóticos respectivamente. Las observaciones son ampliamente las mismas que antes, y es que el estado considerado originalmente no es representativo del comportamiento medio de la base, dando a lugar a una transición bastante más pronunciada.

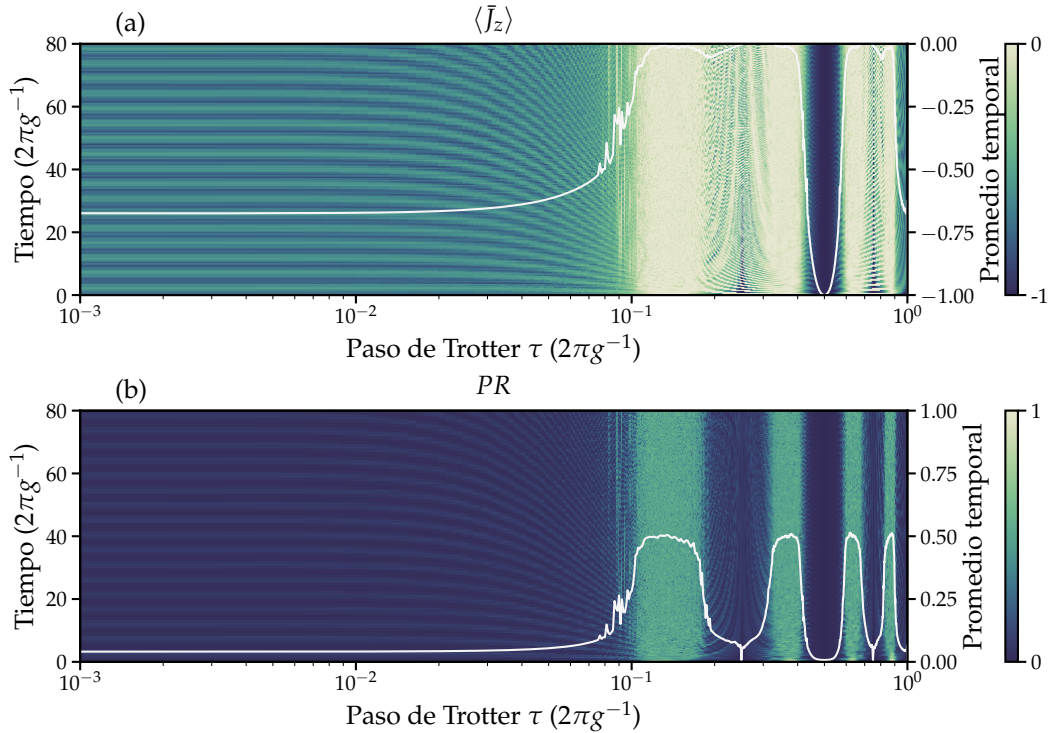


Figura C.4: Dinámica del sistema en función del paso de Trotter con parámetros caóticos y utilizando la trotterización $iz-x$ (3.4). **(a)** Magnetización. **(b)** Localización del estado evolucionado.

Al igual que antes, la dispersión en función del estado inicial es mucho mayor para el caso integrable en el límite de paso de Trotter pequeño en comparación con el caso caótico, para el cual el comportamiento es ampliamente independiente. De nuevo, la excepción se encuentra en la localización por los motivos ya expuestos: el caso integrable da a lugar a dinámica localizada independientemente al estado inicial, y en régimen caótico se deslocalizará, pero la restricción de conservar el valor medio de la energía limita su extensión. Es interesante notar que, a diferencia de la trotterización $i-zx$, vemos una mayor fidelidad media en el régimen caótico que en el integrable, donde en éste último el error crece rápidamente al aumentar el paso de Trotter para la mayoría de los estados. Por el contrario, el error en la magnetización es mayor en el régimen caótico para la mayoría de los valores de τ , excepto en el límite de paso de Trotter pequeño.

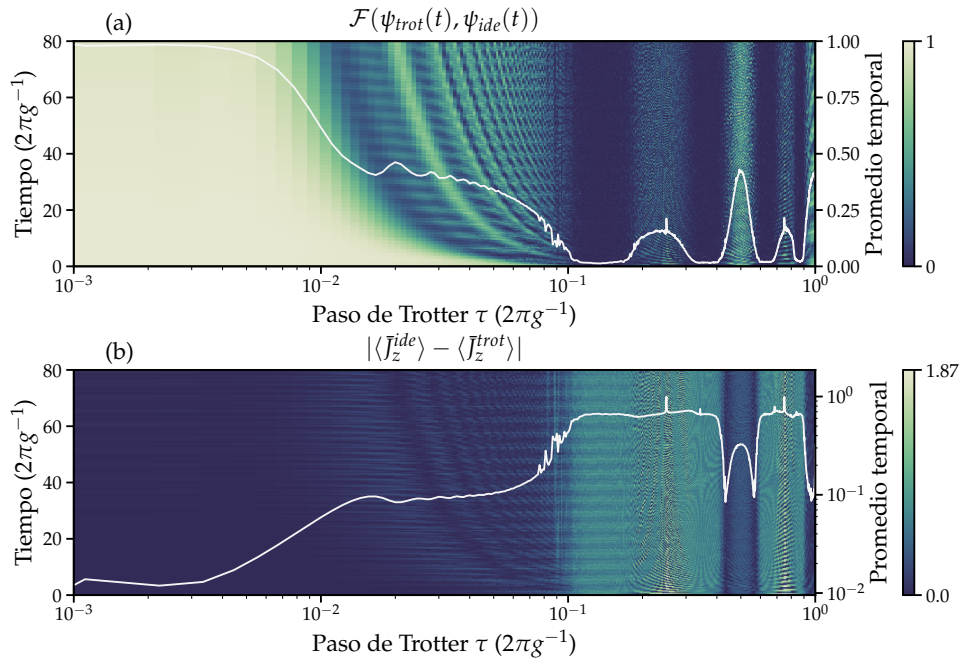


Figura C.5: Error en la dinámica del sistema en función del paso de Trotter con parámetros caóticos y utilizando la trotterización iz-x (3.4), cuantificado mediante la (a) fidelidad de simulación y el (b) error en la magnetización.

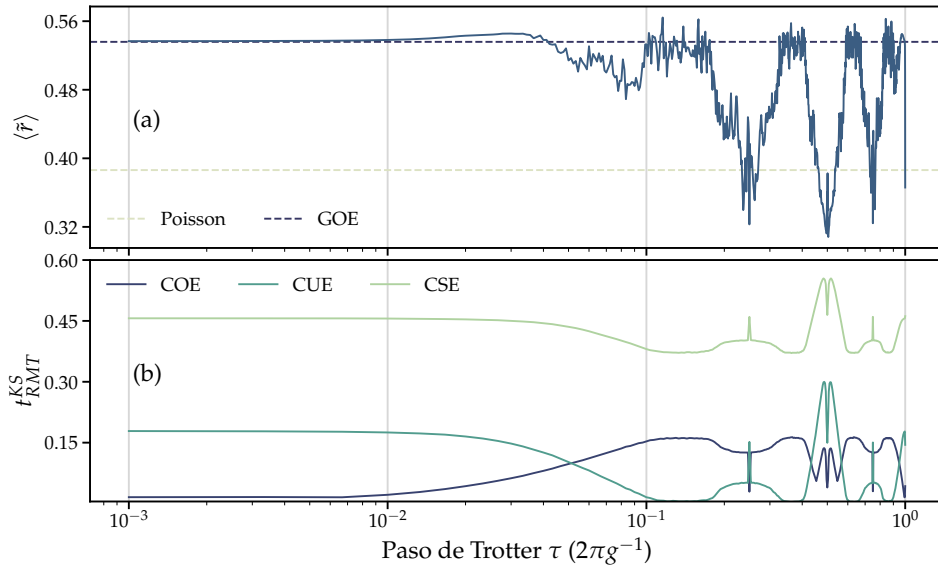


Figura C.6: Caoticidad del sistema en función del paso de Trotter con parámetros caóticos y utilizando la trotterización iz-x (3.4), según (a) el promedio del cociente de espaciado de fases y (b) un test de Kolmogorov-Smirnov comparando la estadística de autoestados de la unitaria trotterizada, respecto a la base de autoestados del hamiltoniano desacoplado ($g = 0$), con las distribuciones de cada ensemble.

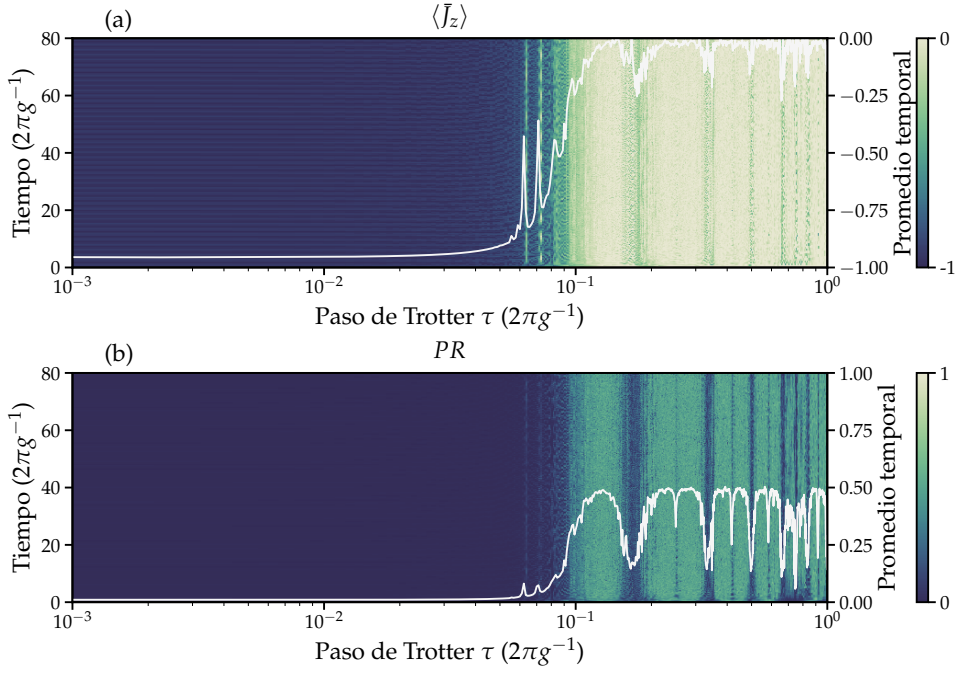


Figura C.7: Dinámica del sistema en función del paso de Trotter con parámetros integrables y utilizando la trotterización ix-z (3.5). (a) Magnetización. (b) Localización del estado evolucionado.

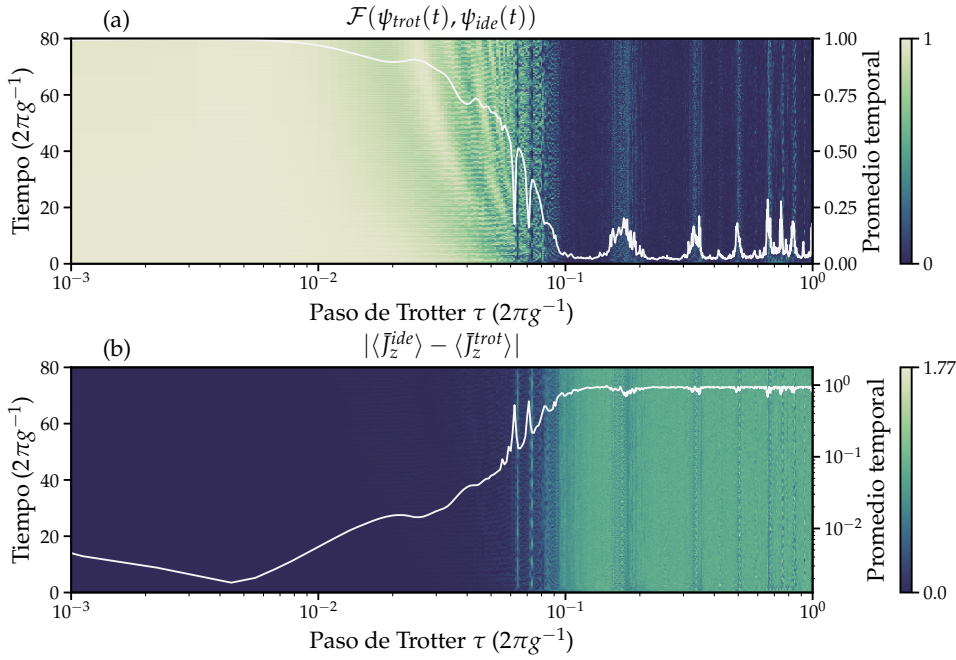


Figura C.8: Error en la dinámica del sistema en función del paso de Trotter con parámetros integrables y utilizando la trotterización ix-z (3.5), cuantificado mediante la (a) fidelidad de simulación y el (b) error en la magnetización.

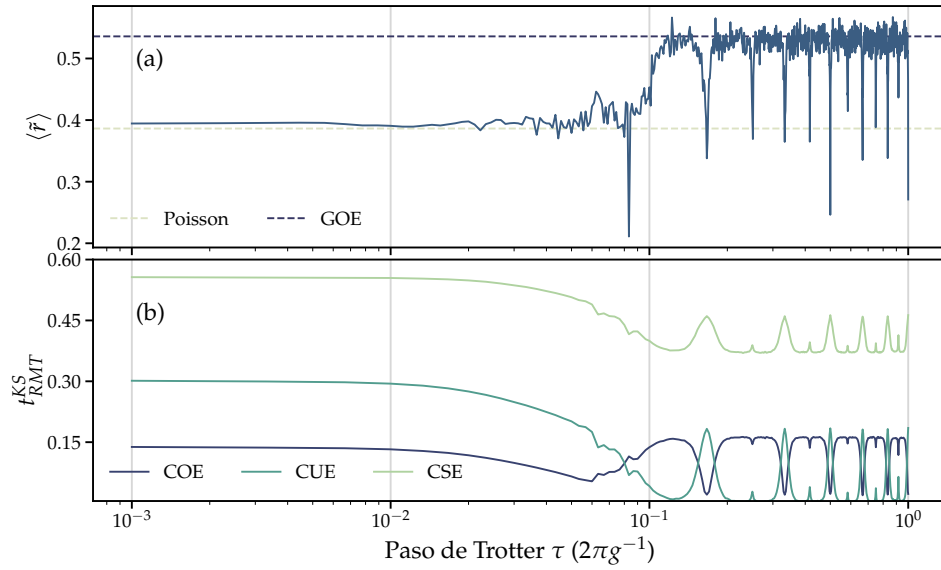


Figura C.9: Caoticidad del sistema en función del paso de Trotter con parámetros integrables y utilizando la trotterización ix-z (3.5), según (a) el promedio del cociente de espaciado de fases y (b) un test de Kolmogorov-Smirnov comparando la estadística de autoestados de la unitaria trotterizada, respecto a la base de autoestados del hamiltoniano desacoplado ($g = 0$), con las distribuciones de cada ensamble.

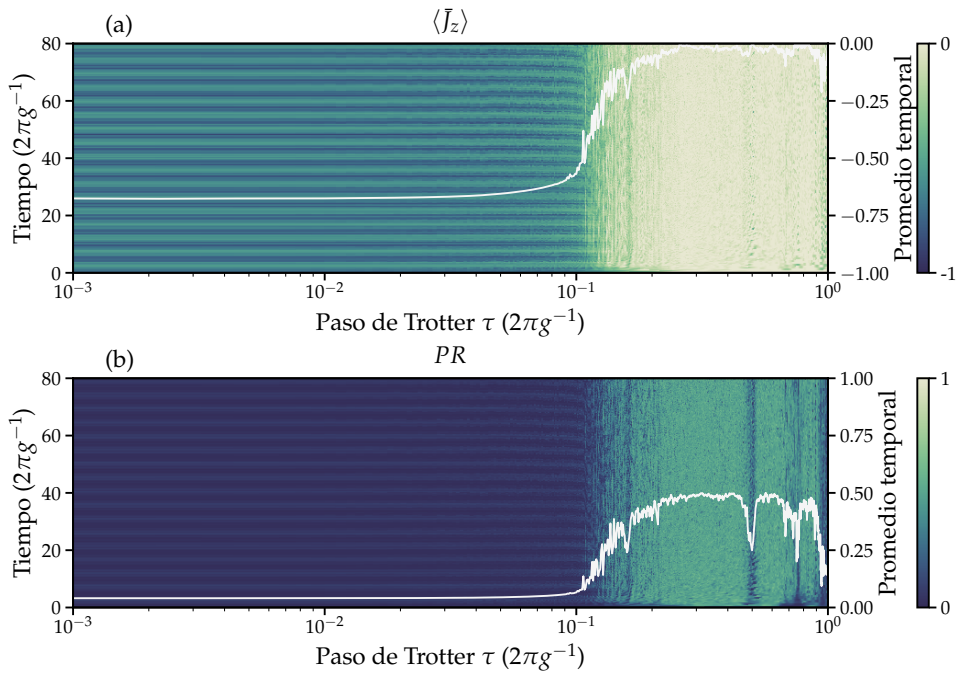


Figura C.10: Dinámica del sistema en función del paso de Trotter con parámetros caóticos y utilizando la trotterización ix-z (3.5). (a) Magnetización. (b) Localización del estado evolucionado.

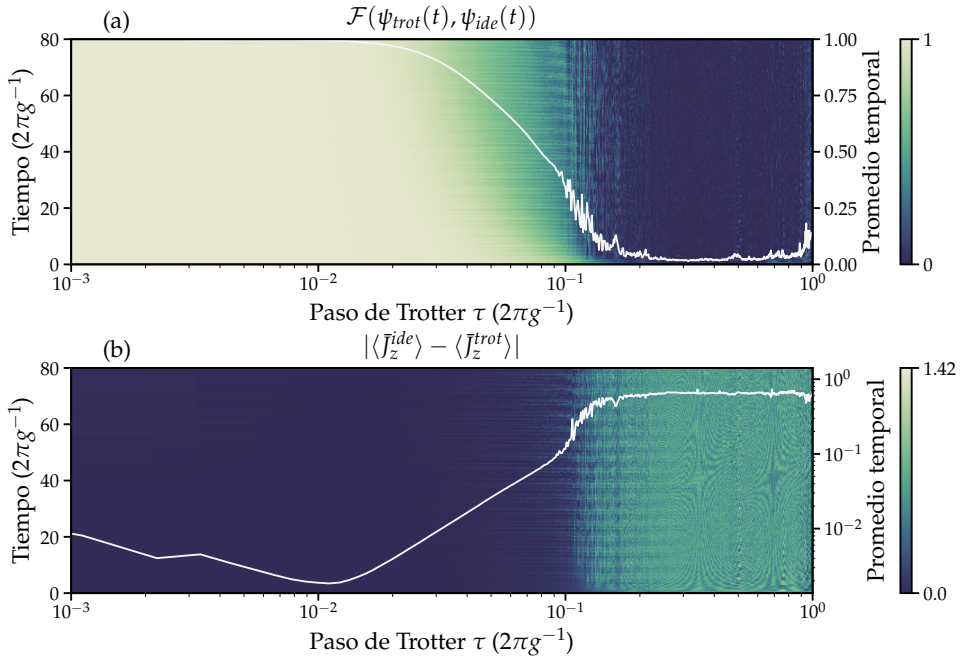


Figura C.11: Error en la dinámica del sistema en función del paso de Trotter con parámetros caóticos y utilizando la trotterización ix-z (3.5), cuantificado mediante la (a) fidelidad de simulación y el (b) error en la magnetización.

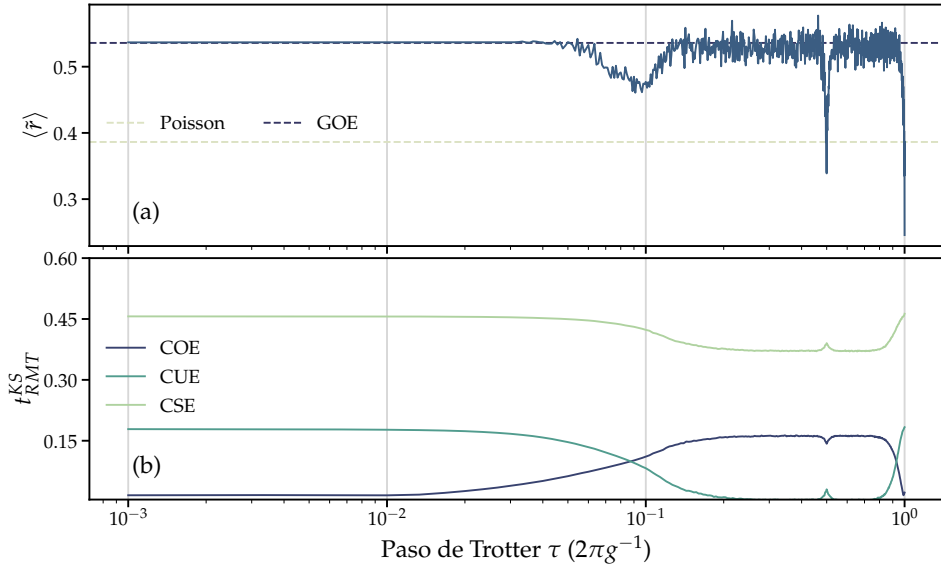


Figura C.12: Caoticidad del sistema en función del paso de Trotter con parámetros caóticos y utilizando la trotterización ix-z (3.5), según (a) el promedio del cociente de espaciado de fases y (b) un test de Kolmogorov-Smirnov comparando la estadística de autoestados de la unitaria trotterizada, respecto a la base de autoestados del hamiltoniano desacoplado ($g = 0$), con las distribuciones de cada ensamble.

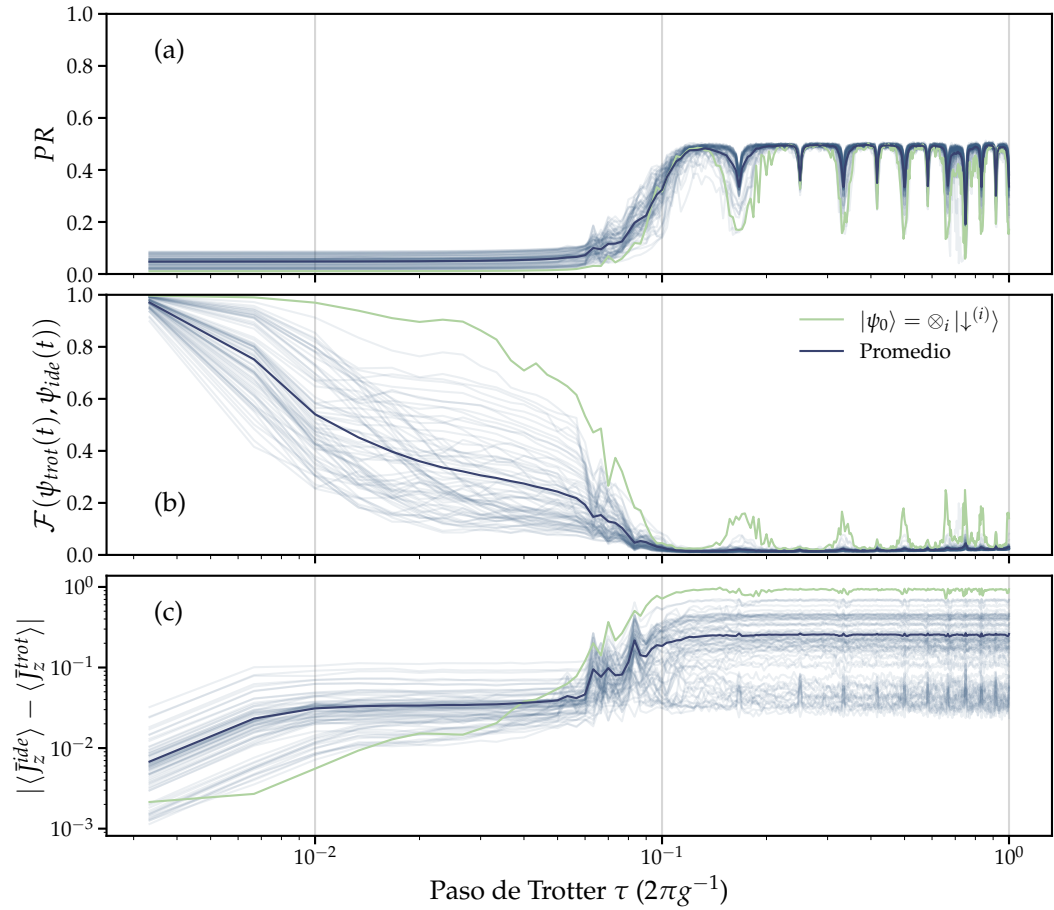


Figura C.13: Localización y medidas de error en la dinámica del sistema (3.1) en función del paso de Trotter con parámetros integrables y utilizando la trotterización ix-z (3.5), para distintos estados iniciales. **(a)** Localización del estado evolucionado. **(b)** Fidelidad de simulación. **(c)** Error en la magnetización. En verde se resalta la curva proveniente del estado inicial ya considerado en la sección 3.1 y en azul oscuro se marca el promedio de todas las curvas.

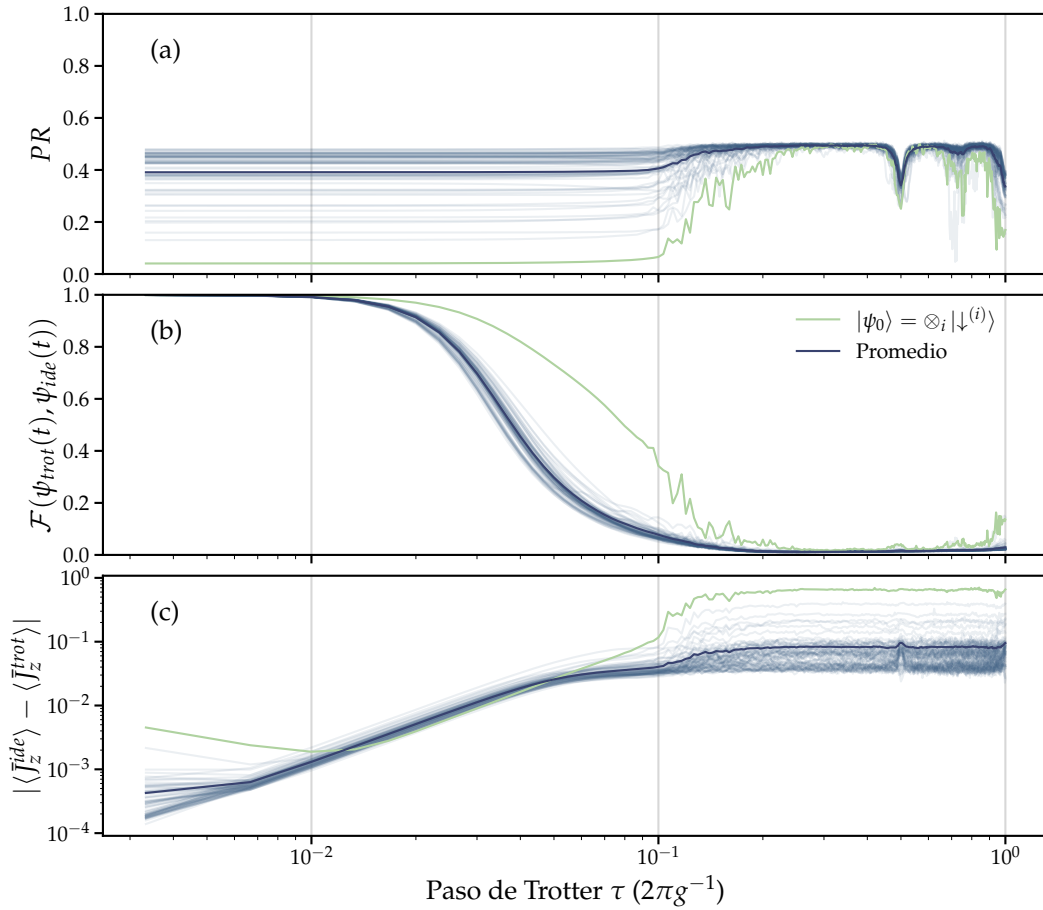


Figura C.14: Localización y medidas de error en la dinámica del sistema (3.1) en función del paso de Trotter con parámetros caóticos y utilizando la trotterización ix-z (3.5), para distintos estados iniciales. **(a)** Localización del estado evolucionado. **(b)** Fidelidad de simulación. **(c)** Error en la magnetización. En verde se resalta la curva proveniente del estado inicial ya considerado en la sección 3.1 y en azul oscuro se marca el promedio de todas las curvas.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Thaddeus D Ladd, Fedor Jelezko, Raymond Laflamme, Yasunobu Nakamura, Christopher Monroe, and Jeremy Lloyd O'Brien. Quantum computers. *nature*, 464(7285):45–53, 2010.
- [2] Richard P Feynman. Simulating physics with computers. In *Feynman and computation*, pages 133–153. CRC Press, 2018.
- [3] Seth Lloyd. Universal quantum simulators. *Science*, 273(5278):1073–1078, 1996, <https://www.science.org/doi/pdf/10.1126/science.273.5278.1073>.
- [4] Andrew M. Childs, Yuan Su, Minh C. Tran, Nathan Wiebe, and Shuchen Zhu. Theory of trotter error with commutator scaling. *Phys. Rev. X*, 11:011020, Feb 2021.
- [5] Hale F Trotter. On the product of semi-groups of operators. *Proceedings of the American Mathematical Society*, 10(4):545–551, 1959.
- [6] Masuo Suzuki. Generalized trotter's formula and systematic approximants of exponential operators and inner derivations with applications to many-body problems. *Communications in Mathematical Physics*, 51(2):183–190, 1976.
- [7] Masuo Suzuki. Decomposition formulas of exponential operators and lie exponentials with some applications to quantum mechanics and statistical physics. *Journal of mathematical physics*, 26(4):601–612, 1985.
- [8] Masuo Suzuki. Fractal decomposition of exponential operators with applications to many-body theories and monte carlo simulations. *Physics Letters A*, 146(6):319–323, 1990.
- [9] Masuo Suzuki. General theory of fractal path integrals with applications to many-body theories and statistical physics. *Journal of Mathematical Physics*, 32(2):400–407, 1991.

- [10] Markus Heyl, Philipp Hauke, and Peter Zoller. Quantum localization bounds trotter errors in digital quantum simulation. *Science advances*, 5(4):eaau8342, 2019.
- [11] Lukas M Sieberer, Tobias Olsacher, Andreas Elben, Markus Heyl, Philipp Hauke, Fritz Haake, and Peter Zoller. Digital quantum simulation, trotter errors, and quantum chaos of the kicked top. *npj Quantum Information*, 5(1):1–11, 2019.
- [12] Cahit Kargi, Juan Pablo Dehollain, Fabio Henriques, Lukas M Sieberer, Tobias Olsacher, Philipp Hauke, Markus Heyl, Peter Zoller, and Nathan K Langford. Quantum chaos and universal trotterisation behaviours in digital quantum simulations. *arXiv preprint arXiv:2110.11113*, 2021.
- [13] Fritz Haake, M Kuś, and Rainer Scharf. Classical and quantum chaos for a kicked top. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 65(3):381–395, 1987.
- [14] Marin Bukov, Luca D’Alessio, and Anatoli Polkovnikov. Universal high-frequency behavior of periodically driven systems: from dynamical stabilization to floquet engineering. *Advances in Physics*, 64(2):139–226, 2015, <https://doi.org/10.1080/00018732.2015.1055918>.
- [15] Wilhelm Magnus. On the exponential solution of differential equations for a linear operator. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 7(4):649–673, 1954, <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/cpa.3160070404>.
- [16] Luca D’Alessio and Anatoli Polkovnikov. Many-body energy localization transition in periodically driven systems. *Annals of Physics*, 333:19–33, 2013.
- [17] Frank Wilczek. Quantum time crystals. *Phys. Rev. Lett.*, 109:160401, Oct 2012.
- [18] Dominic V. Else, Bela Bauer, and Chetan Nayak. Floquet time crystals. *Phys. Rev. Lett.*, 117:090402, Aug 2016.
- [19] Dominic V. Else, Christopher Monroe, Chetan Nayak, and Norman Y. Yao. Discrete time crystals. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 11(1):467–499, 2020, <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031119-050658>.
- [20] Angelo Russomanno, Fernando Iemini, Marcello Dalmonte, and Rosario Fazio. Floquet time crystal in the lipkin-meshkov-glick model. *Phys. Rev. B*, 95:214307, Jun 2017.

-
- [21] M Kus, J Mostowski, and F Haake. Universality of eigenvector statistics of kicked tops of different symmetries. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 21(22):L1073, 1988.
- [22] Karthik Chinni, Manuel H. Muñoz Arias, Ivan H. Deutsch, and Pablo M. Poggi. Trotter errors from dynamical structural instabilities of floquet maps in quantum simulation. *PRX Quantum*, 3:010351, Mar 2022.
- [23] Eric Vernier, Bruno Bertini, Giuliano Giudici, and Lorenzo Piroli. Integrable digital quantum simulation: Generalized gibbs ensembles and trotter transitions. 2022.
- [24] Enej Ilievski, Marko Medenjak, Tomaž Prosen, and Lenart Zadnik. Quasilocal charges in integrable lattice systems. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2016(6):064008, jun 2016.
- [25] Matthieu Vanicat, Lenart Zadnik, and Tomaž Prosen. Integrable trotterization: Local conservation laws and boundary driving. *Phys. Rev. Lett.*, 121:030606, Jul 2018.
- [26] Dávid Szász-Schagrín, Balázs Pozsgay, and Gabor Takacs. Weak integrability breaking and level spacing distribution. *SciPost Physics*, 11(2), aug 2021.
- [27] Kazue Kudo and Tetsuo Deguchi. Unexpected non-wigner behavior in level-spacing distributions of next-nearest-neighbor coupled XXZ spin chains. *Phys. Rev. B*, 68:052510, Aug 2003.
- [28] Luca D'Alessio and Marcos Rigol. Long-time behavior of isolated periodically driven interacting lattice systems. *Phys. Rev. X*, 4:041048, Dec 2014.
- [29] Takashi Ishii, Tomotaka Kuwahara, Takashi Mori, and Naomichi Hatano. Heating in integrable time-periodic systems. *Phys. Rev. Lett.*, 120:220602, May 2018.
- [30] A. Eckardt and M. Holthaus. Dressed matter waves. *Journal of Physics: Conference Series*, 99:012007, 2008.
- [31] Madan Lal Mehta. *Random matrices*. Elsevier, 2004.
- [32] Freeman J. Dyson. Statistical theory of the energy levels of complex systems. i. *Journal of Mathematical Physics*, 3(1):140–156, 1962, <https://doi.org/10.1063/1.1703773>.

- [33] Fritz Haake. *Quantum signatures of chaos*. Springer, 1991.
- [34] Luca D'Alessio, Yariv Kafri, Anatoli Polkovnikov, and Marcos Rigol. From quantum chaos and eigenstate thermalization to statistical mechanics and thermodynamics. *Advances in Physics*, 65(3):239–362, 2016, <https://doi.org/10.1080/00018732.2016.1198134>.
- [35] F.M. Izrailev. Chaotic structure of eigenfunctions in systems with maximal quantum chaos. *Physics Letters A*, 125(5):250–252, 1987.
- [36] O. Bohigas, M. J. Giannoni, and C. Schmit. Characterization of chaotic quantum spectra and universality of level fluctuation laws. *Phys. Rev. Lett.*, 52:1–4, Jan 1984.
- [37] Michael Victor Berry, M. Tabor, and John Michael Ziman. Level clustering in the regular spectrum. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 356(1686):375–394, 1977, <https://royalsocietypublishing.org/doi/pdf/10.1098/rspa.1977.0140>.
- [38] E. B. Bogomolny, B. Georgeot, M.-J. Giannoni, and C. Schmit. Chaotic billiards generated by arithmetic groups. *Phys. Rev. Lett.*, 69:1477–1480, Sep 1992.
- [39] G. Casati, B. V. Chirikov, and I. Guarneri. Energy-level statistics of integrable quantum systems. *Phys. Rev. Lett.*, 54:1350–1353, Apr 1985.
- [40] Hua Wu, Michel Vallières, Da Hsuan Feng, and Donald W. L. Sprung. Gaussian-orthogonal-ensemble level statistics in a one-dimensional system. *Phys. Rev. A*, 42:1027–1032, Aug 1990.
- [41] J. Bauche and C. Bauche-Arnoult. Statistical properties of atomic spectra. *Computer Physics Reports*, 12(1):3–28, 1990.
- [42] Vadim Oganesyan and David A. Huse. Localization of interacting fermions at high temperature. *Phys. Rev. B*, 75:155111, Apr 2007.
- [43] Y. Y. Atas, E. Bogomolny, O. Giraud, and G. Roux. Distribution of the ratio of consecutive level spacings in random matrix ensembles. *Phys. Rev. Lett.*, 110:084101, Feb 2013.
- [44] Fritz Haake and Karol Życzkowski. Random-matrix theory and eigenmodes of dynamical systems. *Physical Review A*, 42(2):1013, 1990.

- [45] Barbara Dietz and Fritz Haake. Taylor and pade analysis of the level spacing distributions of random-matrix ensembles. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 80(1):153–158, 1990.
- [46] YY Atas, Eugene Bogomolny, O Giraud, and G Roux. Distribution of the ratio of consecutive level spacings in random matrix ensembles. *Physical review letters*, 110(8):084101, 2013.
- [47] Aad W Van der Vaart. *Asymptotic statistics*, volume 3. Cambridge university press, 2000.

Tesis disponible bajo Licencia Creative Commons, Atribución – No Comercial –
Compartir Igual (by-nc-sa) 2.5 Argentina
Buenos Aires, 2023