

# Computação Quântica: VQE para Cálculos Moleculares

David Machado Couto Bezerra

davidmachado@alu.ufc.br

Campus Quixadá

5 de julho de 2024



UNIVERSIDADE  
FEDERAL DO CEARÁ  
CAMPUS QUIXADÁ

# Sumário

- 1 Introdução
- 2 Mecânica Quântica
- 3 Computação Quântica
- 4 VQE
- 5 Encerramento



# Introdução

## ■ Contexto e Importância:

- A computação quântica promete revolucionar diversas áreas, incluindo química quântica, finanças, comunicação e biologia.
- A competição entre EUA e China pela supremacia quântica é um dos desenvolvimentos tecnológicos mais importantes da atualidade. Mais informações: Quantum: USA vs China
- Métodos como o Variational Quantum Eigensolver (VQE) são promissores para resolver problemas complexos de energia molecular.

## ■ Objetivos da Apresentação:

- Explicação básica dos conceitos de mecânica quântica.
- Introdução à computação quântica.
- Exploração do VQE para resolver problemas de química quântica.



# Introdução

FORBES &gt; SMALL BUSINESS &gt; ENTREPRENEURS

## The Future Of Climate Could Be In Quantum Computing

Jennifer Turtliuk Former Contributor @  
Climate tech



May 7, 2024, 10:43am EDT

FORBES &gt; INNOVATION &gt; AI

## Quantum Computing Takes Off With \$55 Billion In Global Investments

Sylvain Duranton Contributor @  
I write about tech, deep tech, green tech, and artificial intelligence

Follow



UNIVERSIDADE  
FEDERAL DO CEARÁ  
CAMPUS QUIXADÁ

Fintech

## China 'Closing Gap' on US in Quantum Technology Race – SCMP

March 27, 2024

China leads the world in the number of patents filed for quantum computing technology but still lags behind the United States in terms of capability



TIME  
Made by History

HISTORY • MADE BY HISTORY

## The U.S. Must Win the Quantum Computing Race. History Shows How to Do It

7 MINUTE READ

# Mecânica Quântica



UNIVERSIDADE  
FEDERAL DO CEARÁ  
CAMPUS QUIXADÁ

## EINSTEIN ATTACKS QUANTUM THEORY

Scientist and Two Colleagues  
Find It Is Not 'Complete'  
Even Though 'Correct.'

SEE FULLER ONE POSSIBLE

Believe a Whole Description of  
'the Physical Reality' Can Be  
Provided Eventually.

# Uma breve linha do tempo quântica

- **1900:** O físico alemão Max Planck propôs a hipótese da radiação de corpo negro.
- **1905:** Einstein publicou seu artigo sobre o efeito fotoelétrico.
- **1920:** O termo "mecânica quântica" foi cunhado em um artigo da Universidade de Göttingen.
- **1926:** A equação de onda de Schrödinger foi descoberta.



**Figura:** Principais autores da mecânica quântica no período de 1920-1930.



# Mecânica Quântica

## ■ Pilares Principais:

- Linearidade.
- Perca de determinismo.
- Números Complexos
- Superposição.
- Emaranhamento/Entrelaçamento.

## ■ A equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(x, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right) \Psi(x, t)$$

A solução da equação retorna a função de onda  $\Psi(x, t)$ .

- **interpretação estatística de Born:**  $|\Psi(x, t)|^2$  é a probabilidade de encontrar a partícula em  $x$  no instante  $t$ .



# A Função de Onda

- Se eu realizo uma medição sobre uma partícula e o resultado é que ele está em C, o que isso significa?
  - **Realista:** A partícula estava em C.
  - **Ortodoxa:** A partícula não estava em canto nenhum.
  - **Agnóstica:**...
- A função de onda em um formato geral é descrita por:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t / \hbar}$$

Uma solução  $\psi_n(x)$  associada a uma energia  $E_n$  é chamada de **autovetor**, e  $E_n$  é o **autovalor** correspondente.

- $|c_n|^2$  é a probabilidade de uma medição da energia retornar o valor  $E_n$ .





# Hamiltoniano

- O Hamiltoniano é o operador que retorna a energia total de um sistema:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t)$$

- Para a função de onda  $\Psi_n(x, t)$ , a energia é dada por:

$$\hat{H}\Psi_n(x, t) = E_n\Psi_n(x, t)$$

- O conjunto dos valores  $E_n$  é o **espectro** do Hamiltoniano  $\hat{H}$ .
- $\hat{H}$  atua no espaço das funções complexas de  $x$  e  $t$ .
- O menor valor do espectro é o **estado fundamental**; os outros são **estados excitados**.



# Notação de Dirac

- Na **notação de Dirac**, a função de onda  $\Psi(x, t)$  é representada por um vetor de estado  $|\Psi\rangle$ .
- Este vetor é uma combinação linear dos estados base  $|n\rangle$ :

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

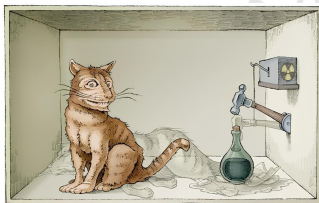
- Os coeficientes  $c_n$  são complexos, e  $|c_n|^2$  representa a probabilidade de encontrar o sistema no estado  $|n\rangle$ .
- A medição de um observável  $\hat{A}$  no estado  $|\Psi\rangle$  é dada pelo valor esperado:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$$



# Superposição

- **Eletromagnetismo:** A soma de duas soluções é a soma de seus campos elétricos e magnéticos.
- **Mecânica quântica:** A superposição das soluções reflete a natureza probabilística das funções de onda, combinando estados com probabilidades associadas.



**Figura:** O famoso experimento mental do gato de Schrödinger



# Entrelaçamento Quântico

- **Definição:** O entrelaçamento quântico ocorre quando o estado de uma partícula afeta instantaneamente o estado de outra, **independentemente da distância**.
- **Paradoxo EPR:** Experimento mental de Einstein, Podolsky e Rosen que desafia a noção de localidade, sugerindo que a informação pode viajar instantaneamente.



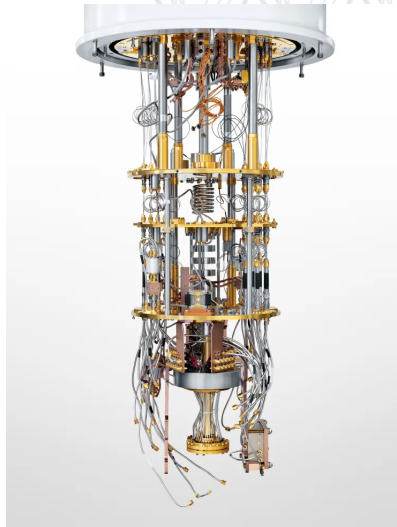
**Figura:** Prêmio Nobel em Física de 2022, para Alain Aspect, John Clauser e Anton Zeilinger.



# Computação Quântica



UNIVERSIDADE  
FEDERAL DO CEARÁ  
CAMPUS QUIXADÁ



# O que é um computador quântico?

- **Definição:** Um computador quântico utiliza princípios da mecânica quântica para realizar cálculos, explorando superposição e entrelaçamento.
- **Qubits:** Unidades básicas de informação quântica, que podem representar uma superposição de 1 ou 0.
- **Vantagem:** Resolve **certos** problemas exponencialmente mais rápido que computadores clássicos.



Figura: Exemplo de um computador quântico



# Qubits

- o qubit é a unidade de informação quântica que pode representar uma combinação linear de estados 0 e 1.

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \quad (1)$$

Os coeficientes  $\alpha$  e  $\beta$  precisam obedecer à relação  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ .

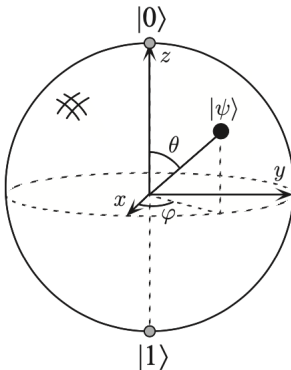
- Para sistemas compostos por múltiplos qubits, trabalha-se em um espaço de Hilbert de dimensão maior.

$$|\Psi\rangle = \bigotimes_{i=0}^n |\psi_i\rangle \quad (2)$$

Onde  $\bigotimes$  denota o produto tensorial e  $n$  é o número de qubits no sistema.



# Esfera de Bloch



**Figura:** Representação visual de um único estado quântico na esfera de Bloch.





# Portas Quânticas

- **Componentes Fundamentais:** Portas quânticas realizam operações em qubits, essenciais para circuitos quânticos.
- **Operadores Unitários:** Governam operações quânticas, conservando a probabilidade total.
- **Portas de 1 Qubit:**
  - Realizam operações básicas como rotações e inversões.
  - Exemplos incluem as portas Pauli-X, Pauli-Y, Pauli-Z, Hadamard (H) e a porta de fase (S).

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Figura: Matrizes de Pauli: X, Y, Z



# Porta CNOT e Entrelaçamento

- **Porta CNOT (Controlled-NOT):** Realiza uma operação condicional em dois qubits: inverte o estado do segundo qubit (target) se o primeiro qubit (control) estiver em  $|1\rangle$ .

- **Operação:**

$$|a, b\rangle \rightarrow |a, a \oplus b\rangle$$

onde  $\oplus$  denota a operação XOR.

- **Entrelaçamento:** A porta CNOT pode gerar estados entrelaçados. Por exemplo, aplicando CNOT em  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle$  resulta no estado entrelaçado  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$ .



# Medições

- **Probabilística:** A computação quântica é inerentemente probabilística, ao contrário da clássica.
- **Repetições:** Algoritmos quânticos requerem múltiplas execuções para resultados confiáveis.
- **Operadores de Medição:** Medições são representadas por operadores irreversíveis.

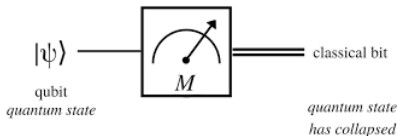
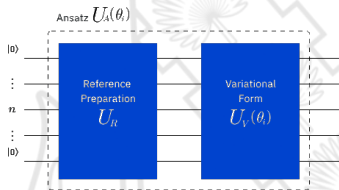


Figura: Diagrama da Medição



# Variational Quantum Eigensolver



# Variational Quantum Eigensolver

- O Variational Quantum Eigensolver (VQE) é um dos algoritmos quânticos variacionais mais proeminentes e tem sido amplamente estudado devido ao seu potencial em química quântica e física de muitos corpos.
- O principal objetivo do VQE é determinar o valor de energia do estado fundamental de uma molécula.
- A abordagem feita pelo algoritmo é híbrida, integrando componentes tanto da computação clássica quanto da quântica.



# Workflow do VQE

■ Algoritmos variacionais possuem componentes modulares:

- 1 **Inicialização:** Preparar o estado  $|0\rangle$  para  $|\rho\rangle$  usando  $U_r$ .
- 2 **Ansatz:** Transformar  $|\rho\rangle$  para  $|\psi(\theta)\rangle$  com  $U_v(\theta)$ .
- 3 **Função de Custo:** Codificar a função de custo com operadores de Pauli e executar o circuito.
- 4 **Otimização:** Enviar resultados para o otimizador clássico e atualizar  $\theta$ .
- 5 **Repetir:** Repetir até encontrar o conjunto otimizado de  $\theta$ .



# Workflow do VQE

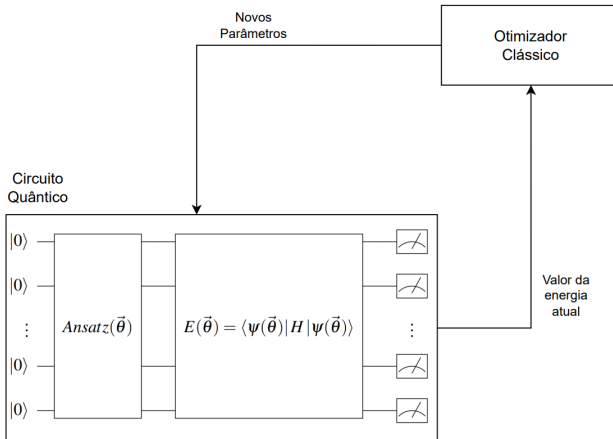


Figura: Funcionamento do VQE.



# O Ansatz

- A inicialização inicial  $U_R |0\rangle = |\rho\rangle$  utiliza um estado referencial para promover uma convergência eficiente em direção ao estado de energia mínima.
- O Ansatz variacional  $U_V(\theta)$  consiste em uma coleção de estados parametrizados que facilitam na busca pelo estado ótimo:

$$|\psi(\theta)\rangle = U_V(\theta) |\rho\rangle = U_V(\theta) U_R |0\rangle$$

- Em um sistema de n-qubits, explorar o espaço completo exigiria cerca de  $2^n$  parâmetros. Portanto, desenvolvem-se Ansatz eficientes que requerem menos parâmetros para uma busca mais viável e otimizada.





# Ansatz Heurístico

Conjuntos de Ansatz gerais são úteis quando falta informação específica. Questões a considerar:

- **Velocidade:** Reduzir o espaço de busca pode acelerar o algoritmo.
- **Precisão:** Reduzir o espaço pode excluir a solução real, resultando em soluções subótimas.
- **Ruído:** Circuitos profundos são mais suscetíveis a ruído; ajuste a conectividade, portas e fidelidade.

Há um *trade-off* entre qualidade e velocidade.



# Função Custo

- **Hamiltoniano:** Na VQE, a função custo é o Hamiltoniano do sistema, na qual é convertido para segunda quantização e mapeado para qubits utilizando Jordan-Wigner, Bravyi-Kitaev, etc.

$$\hat{H} = \sum_{pq} H_{pq} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q + \sum_{pqrs} H_{pqrs} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_r \hat{a}_s + \dots$$

$$\hat{a}_j^\dagger \leftrightarrow Z_1 \otimes Z_2 \otimes \dots \otimes Z_{j-1} \otimes \sigma_j^+ \otimes 1_{j+1} \dots \otimes 1_N$$

$$\hat{a}_j \leftrightarrow Z_1 \otimes Z_2 \otimes \dots \otimes Z_{j-1} \otimes \sigma_j^- \otimes 1_{j+1} \dots \otimes 1_N$$

- **Medição:** O valor esperado do Hamiltoniano  $\langle \psi(\theta) | \hat{H} | \psi(\theta) \rangle$  indica a qualidade da solução.



# Segunda Quantização

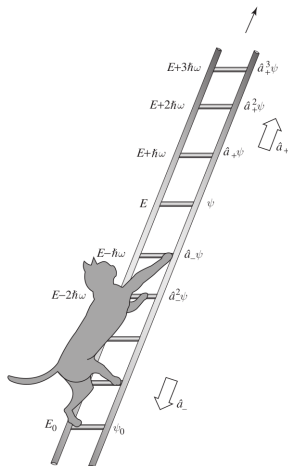


Figura: Operadores de criação e aniquilação.



UNIVERSIDADE  
FEDERAL DO CEARÁ  
CAMPUS QUIXADÁ

# Complexidade do Hamiltoniano

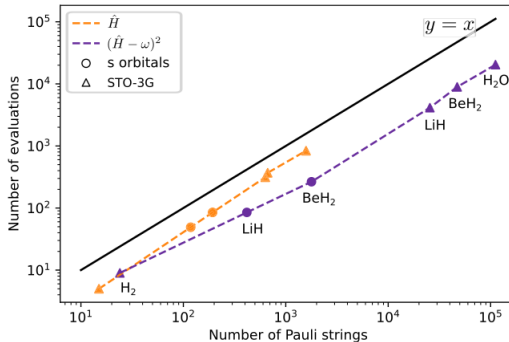


Figura: Comparação do número de avaliações necessárias para o Hamiltoniano sob transformação JW, para vários sistemas.



# Escolha de Otimizadores

## ■ Otimizadores Locais

- Enfocam mínimos próximos ao ponto inicial.
- Eficientes em tempo e recursos, porém suscetíveis a mínimos locais.

## ■ Otimizadores Globais

- Buscam o mínimo global em funções não-convexas.
  - Essenciais quando há muitos mínimos locais.
- 
- No contexto do VQE, onde uma boa estimativa inicial (Ansatz) é comum, otimizadores locais podem ser eficazes.



# Ansatz do H2

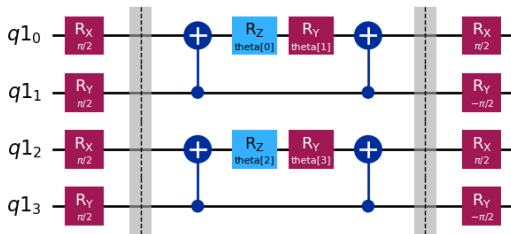


Figura: Ansatz de 4 qubits.



# Ground Energy of H2

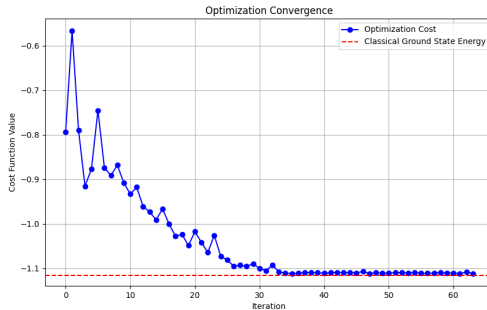


Figura: Convergência do VQE para a molécula de H2.



# Perguntas?



UNIVERSIDADE  
FEDERAL DO CEARÁ  
CAMPUS QUIXADÁ

