

# Taller de Qiskit

## Qiskit Nature

Bruno Eduardo Ramírez Galindo

Qiskit Summer Jam México, Agosto 2021



# Tabla de Contenido

## 1 Química cuántica y estructura electrónica

Química cuántica

Estructura electrónica de la materia

Aplicaciones

Dificultades con el cómputo clásico

## 2 Qiskit Nature

Cómputo cuántico para problemas cuánticos

El problema de estructura electrónica

Cálculo de energía del estado base

## 3 Conclusiones e ideas



«... *it is impossible to represent the results of quantum mechanics with a classical universal device.* »

- Richard Feynman (1981), *Simulating Physics with Computers*



# Tabla de Contenido

## 1 Química cuántica y estructura electrónica

Química cuántica

Estructura electrónica de la materia

Aplicaciones

Dificultades con el cómputo clásico

## 2 Qiskit Nature

Cómputo cuántico para problemas cuánticos

El problema de estructura electrónica

Cálculo de energía del estado base

## 3 Conclusiones e ideas



# ¿Qué es la química cuántica?

La aplicación de la mecánica cuántica y estudio detallado de los espectros energéticos para obtener información acerca de moléculas y otros sistemas químicos.

$$H|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle$$

Mecánica cuántica + Electrodinámica + Fenómenos estéricos = Química

- Caracterización de las interacciones entre moléculas y átomos.
- Estudio de la geometría de moléculas.



# Estructura electrónica de la materia

Una rama de la química cuántica. Estudio detallado de los estados cuánticos correspondientes a los electrones de un átomo al formar moléculas. Importante para conocer el «pegamento» que une a los átomos individuales para formar moléculas estables.

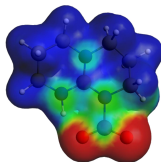


Fig: 3. Simulación de estructura electrónica. CEA/CNRS

- Interacciones electrón-electrón.
- Interacciones electrón-núcleo.



# Algunas aplicaciones

## Desdoblamiento de proteínas

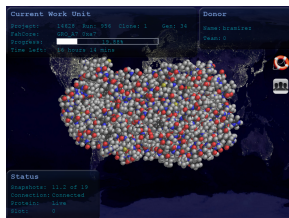


Fig. 3. Simulación de desdoblamiento de proteínas. *Folding@home*

- Estudio de la dinámica de proteínas clave.
- Búsqueda de «bolsillos» donde alojar fármacos.

## Diseño de fármacos

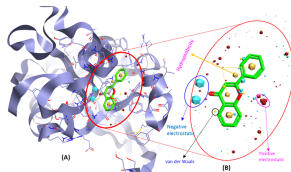


Fig. 4. Fármaco inhibidor de enzima PARP1 que causa BRCA1. *HTECH*

- Control en tiempos de reacción de fármacos.
- Predicción de interacciones fármaco-receptor.



# Química cuántica en computadoras clásicas

Las múltiples interacciones a considerar llevan a ecuaciones diferenciales cuya solución requiere de recursos computacionales considerables.

Se han desarrollado modelos que simplifican de forma ingeniosa los cálculos, y métodos computacionales avanzados:

DFT, LCAO, MRCI, QCI, ...

Aún así, los recursos necesarios para hacer simulaciones de estructura electrónica y mecánica molecular no son accesibles para todos.





# Tabla de Contenido

## 1 Química cuántica y estructura electrónica

Química cuántica

Estructura electrónica de la materia

Aplicaciones

Dificultades con el cómputo clásico

## 2 Qiskit Nature

Cómputo cuántico para problemas cuánticos

El problema de estructura electrónica

Cálculo de energía del estado base

## 3 Conclusiones e ideas



## Qiskit Nature: cómputo cuántico para problemas cuánticos

Los qubits son cuánticos por naturaleza. Siguiendo la filosofía de Feynman, son la opción para el estudio de la química cuántica.

**Simular** estados cuánticos  $\neq$  **Generar** estados cuánticos

**Qiskit Nature** nos permite la integración de los métodos desarrollados para química cuántica con el cómputo cuántico. Aprovechamos que podemos **generar** estados cuánticos para agilizar el cómputo.



# Naturaleza del problema de estructura electrónica

En QC nos interesa conocer el espectro de energía correspondiente a los estados electrónicos de una molécula con  $N$  núcleos e  $i$  electrones, para eso buscamos los eigenvalores correspondientes al hamiltoniano (en la aproximación B-O):

$$\mathcal{H}_{\text{el}} = - \sum_i \frac{\nabla_{r_i}^2}{m_e} - \sum_I \sum_i \frac{Z_I e^2}{|R_I - r_i|} + \sum_i \sum_{j>i} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}$$

El objetivo del problema es «traducir» este operador hamiltoniano a un **circuito cuántico**. Obtener el llamado «hamiltoniano de qubits».



## Paso intermedio: Método de Hartree-Fock

En nuestra búsqueda del hamiltoniano de qubits hay que hacer una parada, una transformación\* de  $\mathcal{H}_{el}$  mediante el método de Hartree-Fock [3].

$$\mathcal{H}_{el} = - \sum_i \frac{\nabla_{r_i}^2}{m_e} - \sum_I \sum_i \frac{Z_I e^2}{|R_I - r_i|} + \sum_i \sum_{j>i} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}$$

$$\mathcal{H}_{el} = \sum_{pq} h_{pq} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q + \frac{1}{2} \sum_{pqrs} h_{pqrs} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_r \hat{a}_s$$

- Transformación a estados de Fock:  $|00100 \dots 1\rangle$
- Laplacianos & Interacciones de Coulomb  $\Rightarrow \hat{a}_j, \hat{a}_j^\dagger, \hat{N}$



## Paso intermedio: Método de Hartree-Fock

Este paso está asistido por el cómputo clásico. Los coeficientes en el último hamiltoniano son calculables de forma eficiente en programas de cómputo clásico.

Coeficientes como integrales:  $h_{pq}$

$$h_{pq} = \int \phi_p^*(r) \left( -\frac{1}{2} \nabla^2 - \sum_l \frac{Z_l}{R_l - r} \right) \phi_q(r)$$

Esta transformación mediante el método de Hartree-Fock y el cálculo de estas integrales se hacen en programas llamados «drivers»:

- Gaussian
- PySCF
- PyQuante



## Paso final: Mapeos

Como último paso en búsqueda de nuestro hamiltoniano de qubits se deben establecer equivalencias entre los operadores, llamados **mapeos** [4].

$$\{\hat{a}, \hat{a}^\dagger, \hat{N}\} \Rightarrow \{\sigma^X, \sigma^Y, \sigma^Z, I\} \text{ ej. } \hat{a}_j^\dagger = \bigotimes_{i=1}^{j-1} \hat{\sigma}_i^Z \otimes (\hat{\sigma}_j^X + i\hat{\sigma}_j^Y)$$

Los operadores fermiónicos sobre estados de Fock se convierten en operadores unitarios sobre qubits. ¡Así tenemos nuestro hamiltoniano de qubits!

$$\mathcal{H}_{el,q} = \sum c_i \sigma_i^a \sigma_i^b \sigma_i^c \dots \sigma_i^n$$

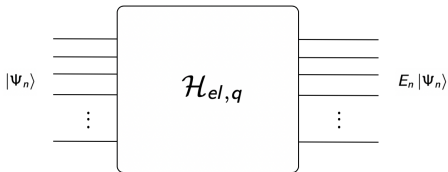
Estas equivalencias están programadas en Qiskit Nature

```
1 from qiskit_nature.mappers.second_quantization import
   JordanWignerMapper, ParityMapper, BravyiKitaevMapper
```



## Utilidad de este problema

El hecho de poder traducir un hamiltoniano electrónico a un hamiltoniano de qubits abre las puertas para muchos cálculos en cómputo cuántico. Podemos aplicar este hamiltoniano de qubits a un estado particular en forma de un circuito cuántico y determinar su energía (eigenvalores).



*Fig: 5. Aplicación del hamiltoniano de qubits como un circuito*

Adelante veremos como  $\mathcal{H}_{el,q}$  puede ser utilizado para calcular la energía del estado base.



## Energía del estado base

El «principio variacional», establece que dado un hamiltoniano  $\mathcal{H}$ , el valor esperado de este con respecto a **cualquier estado** es mayor o igual que un eigenvalor determinado.

$$E_{min} \leq \langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle$$

si tenemos  $\mathcal{H}_{el}$ , queremos buscar el estado electrónico  $|\psi\rangle_{min}$  para el cual

$$E_{min} = \min \langle \psi | \mathcal{H}_{el} | \psi \rangle_{min}$$

Buscaremos este estado de mínima energía explorando las energías de muchos estados posibles hasta encontrar el mínimo.





# Qiskit Nature y el VQE

Adelante se describe cómo se hace la búsqueda optimizada del estado de mínima energía para una molécula en Qiskit Nature, proceso conocido como el VQE (Solucionador propio cuántico):

- 1 Comenzar con el número  $n$  de qubits necesarios en un estado inicial  $|\psi_0\rangle$
- 2 **Preparar\*** un estado arbitrario  $|\psi(\vec{\theta})\rangle$  mediante un circuito parametrizado

$$|\psi(\theta)\rangle = U(\vec{\theta}) |\psi_0\rangle$$

- 3 Utilizar el hamiltoniano de qubits  $\mathcal{H}_{el,q}$ , **cortesía de Qiskit Nature** para obtener la energía del estado  $|\psi(\vec{\theta})\rangle$

$$E_{\vec{\theta}} = \langle \psi(\vec{\theta}) | \mathcal{H}_{el,q} | \psi(\vec{\theta}) \rangle$$

- 4 Regresar al paso 2, cambiando los parámetros en  $\vec{\theta}$  para ver si obtenemos una energía menor.
- 5 Repetir hasta llegar a un valor mínimo.



# Tabla de Contenido

## ① Química cuántica y estructura electrónica

Química cuántica

Estructura electrónica de la materia

Aplicaciones

Dificultades con el cómputo clásico

## ② Qiskit Nature

Cómputo cuántico para problemas cuánticos

El problema de estructura electrónica

Cálculo de energía del estado base

## ③ Conclusiones e ideas



## Conclusiones e ideas

En conclusión, hemos aprendido:

- Qué son la química cuántica y la estructura electrónica: para qué sirven y que dificultades hay en estas áreas.
- Cómo es posible utilizar cómputo cuántico para agilizar cálculos en estas áreas.
- Acerca del problema de estructura electrónica y el VQE en Qiskit Nature.

Algunas ideas de proyectos para el QSJM:

- Hacer el cálculo de la energía de estado base (excitado) para tu molécula favorita.



¡Gracias!



## Referencias

- ① Quantum chemistry and molecular simulations. Consultado en [https://iramis cea.fr/Phoce/Vie\\_des\\_labos/Ast/ast\\_sstheme.php?id\\_ast=2101](https://iramis cea.fr/Phoce/Vie_des_labos/Ast/ast_sstheme.php?id_ast=2101)
- ② QSAR modelling and molecular docking to predict the anti-cancer activity of PARP-1 inhibitors. Consultado en <https://iitcc.org/portfolio/qsar-modelling-and-molecular-docking-to-predict-the-anti-cancer-acti>
- ③ Szabo, A., Ostlund, N. S. (2012). Modern quantum chemistry: introduction to advanced electronic structure theory. Courier Corporation.
- ④ Steudtner, M., Wehner, S. (2018). Fermion-to-qubit mappings with varying resource requirements for quantum simulation. New Journal of Physics, 20(6), 063010.

