



ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE  
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská



# Kvantové variační metody pro použití ve fyzice

Bakalářská práce

Autor: **Štěpán Skalka**  
Vedoucí práce: **Ing. Bc. Michal Křelina, Ph.D.**  
Akademický rok: 2023/2024

*Poděkování:*

*Čestné prohlášení:*

Prohlašuji, že jsem tuto práci vypracoval samostatně a uvedl jsem všechnu použitou literaturu.

V Praze dne 5. srpna 2024

Štěpán Skalka

## Název práce

*Studijní program:* Celý název studijního programu (nikoliv zkratka)

*Specializace:* Celý název specializace (Pokud se studijní program nedělí na specializace, tuto řádku odstranit.)

*Druh práce:* Bakalářská práce

*Vedoucí práce:* prof. Ing. Jméno Školitele, DrSc., pracoviště školitele (název instituce, fakulty, katedry...)

*Konzultant:* doc. RNDr. Jméno Konzultanta, CSc., pracoviště konzultanta. Pouze pokud konzultant byl jmenován.

[illegible]

**Klíčová slova:** klíčová slova (nebo výrazy) seřazená podle abecedy a oddělená čárkou

*Title:*

### Title of the Work

*Author:* Author's Name

[illegible]

**Key words:** keywords in alphabetical order separated by commas

# Obsah

	Page
<b>Poděkování</b>	<b>ii</b>
<b>Abstrakt</b>	<b>iii</b>
<b>Obsah</b>	<b>iv</b>
<b>Úvod</b>	<b>vi</b>
<b>I Teoretická část</b>	<b>1</b>
<b>1 Úvod do kvantové informatiky</b>	<b>2</b>
1.1 Qbit . . . . .	2
1.1.1 Kvantové brány . . . . .	3
1.1.2 Pauliho Brány . . . . .	4
1.2 Více Qbitů . . . . .	5
1.3 Brány pro více qbitů . . . . .	7
1.3.1 Kvantové provázání . . . . .	7
1.3.2 Bellovy stavy . . . . .	7
1.3.3 No-clonning theorem . . . . .	7
1.4 Kvantový paralelismus . . . . .	7
1.5 Kvantové obvody . . . . .	8
1.5.1 Parametrizované obvody . . . . .	8
1.6 Měření na kvantovém počítači . . . . .	8
1.6.1 Měření v Bázi . . . . .	10
1.6.2 Měření operátorů . . . . .	11
1.7 Simulace na kvantovém počítači . . . . .	12
1.8 Fyzické kvantové počítače . . . . .	13
1.8.1 Implementace . . . . .	13
1.8.2 Šum . . . . .	13
<b>2 Variační kvantové algoritmy</b>	<b>14</b>
2.1 QAOA . . . . .	14
2.2 VQE . . . . .	14
2.2.1 Variační princip . . . . .	14
2.2.2 Quantum phase estimation . . . . .	15
2.2.3 Aplikace VQE . . . . .	15
<b>3 VQE</b>	<b>16</b>
3.1 Popis algoritmu . . . . .	16
3.2 Enkódování Hamiltoniánu . . . . .	18
3.2.1 Částice ve sféricky symetrickém potenciálu . . . . .	19
3.2.2 Nerozlišitelné částice . . . . .	19

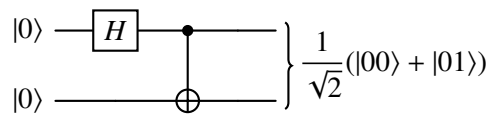
3.2.3	První kvantování . . . . .	19
3.2.4	Druhé kvantování . . . . .	19
3.2.5	Jordan-Wiegenerova transformace . . . . .	20
3.3	Ansatz . . . . .	20
3.4	Měření . . . . .	20
3.4.1	Pauliho řetězce . . . . .	20
3.4.2	Diagonalizace . . . . .	20
3.4.3	Seskupení . . . . .	20
3.5	Optimizéry . . . . .	20
3.5.1	Gradientní . . . . .	20
3.5.2	Negradientní . . . . .	20
3.6	Modifikace a budoucnost . . . . .	21
3.6.1	Paralelizace . . . . .	21
3.6.2	Excitované stavy . . . . .	21
3.6.3	Folded Spectrum VQE . . . . .	21
3.6.4	Cascaded VQE . . . . .	21
<b>4</b>	<b>Kvarkonia (Vektorové mezony)</b>	<b>22</b>
<b>II</b>	<b>Praktická část</b>	<b>23</b>
	<b>Závěr</b>	<b>24</b>
	<b>Bibliografie</b>	<b>26</b>

# Úvod

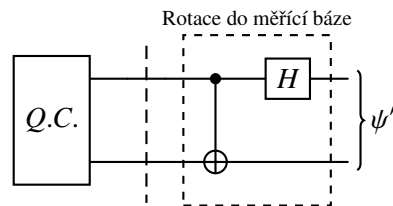
**Test citací:** [1], [2], [3], [4], [5], [6], [7], [8], [9] [10] [11]

**Test braketů:**  $\langle\psi|, |\phi\rangle, \langle\psi|\phi\rangle, \langle\psi|\hat{H}|\phi\rangle, \langle\psi|\hat{H}|\phi\rangle, \langle\psi|\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}|\phi\rangle$

**Test obvodů:**



Obr. 1: Obvod pro vytvoření Bellových stavů.



Obr. 2: Obvod pro měření v Bellově bázi. Po aplikaci dodatečného CNOT a H odpovídá naměření  $|0\rangle$  projekci původního obvodu Q.C. do stavu  $|+\rangle$ , obdobně naměření  $|1\rangle$  odpovídá projekci do  $|-\rangle$ .

# **Část I**

## **Teoretická část**

# 1 Úvod do kvantové informatiky

Rapidní vývoj klasické výpočetní techniky posledních několika dekád pravděpodobně směřuje k postupnému útlumu **dost silné tvrzení. Z čeho tak soudíte? Já si to třeba nemyslím.** . (Najít nějakou seriózní referenci) Je tedy na místě hledat alternativní technologie. Značný posun v některých typech úloh slibují kvantové počítače, které budou stručně popsány v této kapitole. Detailnější popis lze nalézt například v knize [3], či učebnici [10], ze kterých bylo čerpáno při zpracování této kapitoly. Před samotným popisem je však dobré si pro srovnání uvědomit pár základních faktů o počítačích klasických. Základní výpočetní jednotku a jednotku informace v nich představuje *bit*, který může nabývat jednoho ze dvou stavů, obvykle označovaných 0 a 1. Na bity jsou aplikovány tzv. *logické brány*, které mohou měnit stav bitu. Bity a brány jsou seskupovány do *logických obvodů*. Teorie klasických počítačů je vybudována nezávisle na fyzické implementaci. Nezáleží, zda jsou bity a brány realizovány jako tranzistor, elektronka, či voják s vlaječkou [12]. Obdobně, nezávisle na praktické realizaci, je vybudována i teorie kvantových počítačů. Základní výpočetní jednotkou a jednotkou informace je analogie bitu nazývaná *kvantový bit*, jehož název je obvykle zkracován na *qbit* **"qubit" je mnohonásobně rozšířenější pojem. Ale je to na vás.** .

## 1.1 Qbit

Qbit lze pro účely této teoretické kapitoly chápat jako matematický objekt reprezentující **dvoustavový** kvantový systém. Qbit má obdobně jako klasický bit také dva možné stavy, obvykle označované  $|0\rangle$  a  $|1\rangle$ . Na rozdíl od bitu však může nabývat i libovolné superpozice těchto stavů. Qbit lze chápat jako normalizovaný vektor z Hilbertova prostoru o dvou dimenzích.

Často však pro účely kvantové informatiky používáme namísto klasické vektorové notace tzv. *Diracovu (braketovou) notaci*. V této notaci *ket*  $|\cdot\rangle$  reprezentuje prvek nějakého Hilbertova prostoru a *bra*  $\langle\cdot|$  prvek duálního prostoru k tomuto Hilbertově prostoru. Jejich spojení, *braket*  $\langle\cdot|\cdot\rangle$  pak označuje skalární součet dvou ketů. S využitím této notace lze standardní bázi prostoru qbitu zapsat jako:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = |0\rangle, \quad \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = |1\rangle. \quad (1.1)$$

Tato báze bývá v kvantové informatice často nazývána také *standardní výpočetní báze*. Obecný stav qbitu, který je lineární kombinací těchto dvou bazických vektorů lze vyjádřit následovně:

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle, \quad (1.2)$$

kde  $\alpha$  a  $\beta$  jsou libovolná komplexní čísla, která bývají někdy nazývána **spíše jsou to amplitudy z definice, než že by to byl jen název amplitudy**. V klasické vektorové notaci má obecný stav qbitu tvar:

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}. \quad (1.3)$$

Informaci o superpozici však nelze získat měřením **špatná formulace. Čím jiným než měřením?** . Z postulátů kvantové mechaniky plyne, že měřením qbitu lze získat pouze stav  $|0\rangle$  s pravděpodobností  $|\alpha|^2$  nebo stav  $|1\rangle$  s pravděpodobností  $|\beta|^2$ , měřením je superpozice ztracena a qbit nabude jednoho z těchto stavů. Tento mechanismus spadnutí systému do naměřeného systému bývá nazýván *kolaps*. Tato statistická interpretace bývá také nazývána *Bornovou interpretací* a plyne z ní omezující podmínka na



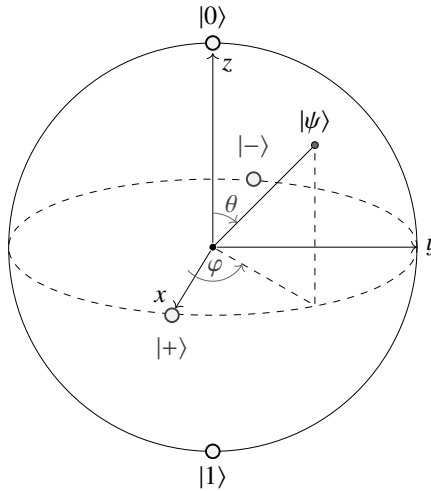
koeficienty  $\alpha$  a  $\beta$ . Musí splňovat rovnost  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ . Stav qbitu tedy musí být normalizován. Dalším důsledkem je irrelevance tzv. *globální fáze*. Obecný stav qbitu (1.2) lze přepsat následujícím způsobem:

$$|\psi\rangle = e^{i\gamma} \left( \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle \right), \quad (1.4)$$

kde jsou koeficienty  $\alpha$  a  $\beta$  z (1.2) parametrizovány úhly  $\theta$ ,  $\varphi$  a  $\gamma$ . Fáze  $e^{i\varphi}$  bývá nazývána *relativní fáze*,  $e^{i\gamma}$  *globální fáze*. Z Bornova pravidla plyne, že globální fáze nemá žádný efekt na pravděpodobnosti naměření  $|0\rangle$ , či  $|1\rangle$ . Může být proto vynechána a obecný stav v této parametrizaci je obvykle zapisován jako:

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle. \quad (1.5)$$

Úhly  $\varphi$  a  $\theta$  charakterizují bod na *Blochově sféře* vyobrazené na Obr. 1.1. Jedná se o alternativní znázornění qbitu. Na této sféře póly odpovídají stavům  $|0\rangle$  a  $|1\rangle$ .



Obr. 1.1: Reprezentace qbitu pomocí Blochovy sféry

Dále lze na Obr. 1.1 pozorovat stavy  $|+\rangle$  a  $|-\rangle$ . Tyto stavy tvoří alternativní bázi prostoru qbitu a jsou definovány jako:

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle), \quad (1.6)$$

případně v klasické vektorové notaci:

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (1.7)$$

Tato dvojice stavů bývá také často nazývána *Hadamardova báze*. Pro popis postupu získání těchto stavů (a i jiných, obecnějších) je třeba zavést pojem *kvantových bran*, které umožňují provádět operace s qbity.

### 1.1.1 Kvantové brány

*Kvantové brány*, někdy také označovány jako *Kvantová hradla* představují analogii k logickým branám na klasických počítačích. Pro jeden bit existuje pouze jedna netriviální operace, a to operace, která zneuguje stav bitu (o stavech 1 a 0 uvažujeme jako o pravdivostních hodnotách). Tato operace je realizována logickou branou nazývanou *NOT*. Obdobnou operaci lze provést i na qbitu:

$$\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle \rightarrow \alpha |1\rangle + \beta |0\rangle, \quad (1.8)$$

kde NOT navíc působí lineárně. Bránu, která provádí toto kvantové NOT nazýváme *X brána* a lze ji reprezentovat v maticovém zápisu

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.9)$$

po aplikaci na obecný stav ve vektorové notaci provede operaci kvantového NOT:

$$X \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \beta \\ \alpha \end{bmatrix}. \quad (1.10)$$

Na rozdíl od klasických počítačů neexistuje pro jeden qbit pouze jedna netriviální operace. Díky vlastnosti superpozice jich dokonce existuje nekonečně mnoho **jsou teorémy, že ve skutečnosti jich stačí jen pár zbytek se z nich odvodí**. Jak bylo nastíněno v případě brány X, kvantové brány pro jeden qbit jsou reprezentovány pomocí 2x2 matic. Na tyto matice je však nutno vznést určitá omezení.

Operace na qbitech by měly ideálně být reverzibilní **ne, že by "měly", ale ony jsou z toho důvodu, že musí být unitární**. Dále by také měly **opět, musí** zachovávat normalizaci stavu, aby platilo Bornovo pravidlo. Z těchto požadavků plyne, že kvantové brány musí v maticové reprezentaci odpovídat unitárním maticím. Unitární matice zachovávají normu a vždy pro ně existuje inverzní matice, která je rovna Hermitovsky sdružené matici. **Tento odstavec je matoucí, obvykle řekneme, že je to unitární a z co z toho plyne. Jinak z čeho plyne, že by to mělo být reverzibilní? Zvláště pokud klasické nejsou?** Tedy pro Unitární matici platí:

$$U^\dagger U = I, \quad \|U|\psi\rangle\| = \langle\psi|U^\dagger U|\psi\rangle^{1/2} = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} = 1. \quad (1.11)$$

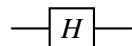
**Doporučuji u všech operatorů psát "hat", jak v textu tak ve vzorcích.** Brány však nemusí být Hermitovské, a tudíž můžou, ale nemusí být zároveň i kvantovými pozorovatelnými. Další důležitou bránou je *Hadamardova brána* H. Ta transformuje vektory standardní výpočetní báze na stavy  $|+\rangle$  a  $|-\rangle$ .

$$\hat{H}(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) = \alpha \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} + \beta \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle \quad (1.12)$$

**Torchu nestandardní. Osobně bych na dva řádky dal jednu aplikaci na 0 a druhou na 1.** Operaci H lze také interpretovat v reprezentaci Blochovy sféry jako rotaci o úhel  $\frac{\pi}{2}$  kolem osy  $y$  následovanou rotací o úhel  $\pi$  kolem osy  $x$ , viz Obr. 1.1. Maticové vyjádření Hadamardovy brány má tvar:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.13)$$

V notaci pro *kvantové obvody*, které slouží k spojení více bran a qbitů pro složitější operace znázorňujeme Hadamardovu bránu následovně.



Obr. 1.2: Notace hadamardovy brány v kvantových obvodech.

### 1.1.2 Pauliho Brány

Dalšími důležitými kvantovými branami jsou Pauliho brány X, Y a Z. Obdobně jako matice Hadamardovy brány jsou matice Pauliho bran, nazývané *Pauliho matice*, Hermitovské a jsou tedy také kvantovými pozorovatelnými. Pojmy Pauliho brána, matice a operátor proto bývají často zaměňovány. Fyzikálně představují ve spinorové reprezentaci projekci spinu do příslušných os. Jsou-li interpretovány jako pozorovatelné, značí se obvykle  $\hat{\sigma}_x$ ,  $\hat{\sigma}_y$  a  $\hat{\sigma}_z$ . Jejich matice mají tvar:

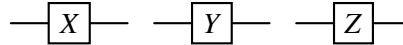
$$\hat{\sigma}_x = X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = Y = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.14)$$

Notace pro kvantové obvody je zobrazena na Obr. 1.3. Další důležitou vlastností Pauliho matic je, že společně s identitou tvoří bázi všech 2x2 matic a tudíž jejich lineární kombinací lze vytvořit libovolnou jinou kvantovou bránu. Hadamardovu bránu lze například rozepsat jako:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + Z). \quad (1.15)$$

VL. číslo	$X$	$Y$	$Z$
$\lambda = +1$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix},  +\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix},  0\rangle$
$\lambda = -1$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix},  -\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix},  1\rangle$

Tab. 1.1: Tabulka popisující spektrum Pauliho operátorů. **misto ", "bych dal =**



Obr. 1.3: Notace Pauliho bran v kvantových obvodech.

Důležitou roli, obzvláště pro měření kvantových pozorovatelných <sup>[1.6.2]</sup>, mají vlastní vektory a vlastní hodnoty Pauliho matic. Jejich shrnutí lze nalézt v tabulce 1.1. Za povšimnutí stojí fakt, že vlastní vektory  $Z$  odpovídají standardní výpočetní bázi. Tato báze se z tohoto důvodu někdy nazývá také  $Z$  báze.

Další vlastností, důležitou obzvláště pro variační kvantové algoritmy, kterými se tato práce zabývá <sup>[3.4.3]</sup> je, že po přenásobení imaginární jednotkou tvoří Pauliho matice bázi Lieovy algebry  $SU(2)$  a splňují následující komutační relace

$$[\hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k] = 2i\epsilon_{jkl}\hat{\sigma}_l \quad (1.16)$$

a následující antikomutační relace

$$\{\hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k\} = 2\delta_{jk}\hat{I}. \quad (1.17)$$

### -Rozklad brány do rotací a univerzální brány - DOPSAT!!!

**Solovay-Kitaev Theorem....asi jenom důsledky a odkaz na článek**

Další kvantové brány pro jeden qbit lze nalézt na Obr. 1.6. Logickým krokem dopředu jsou nyní brány pro více qbitů. Před jejich zavedením je však nejprve vhodné zavést notaci pro více qbitů.

- používáme Diracovu (Bra(c)-ketovou) notaci.
- Ket odpovídá vektoru z Hilbertova prostoru
- Bra je prvek duálního prostoru
- Braket představuje skalární součin. -Superpozice!! -> Hilbertův prostor -> paprsek, Bornovo pravidlo, pravděpodobnost, normalizace
- výpočetní báze
- jiná báze - + a -, znázornit i vektorově
- vytvoříme pomocí hadamardovy brány
- brány jsou reverzibilní
- brány unitární
- pauli + hadamard zároveň i pozorovatelné
- X,Y,Z používáno pro brány,  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  spíše pro pozorovatelné
- pauli generátor  $SU(2)$  (násobené i)
- pauliho matice + jejich vl. stavy a čísla (obě notace)
- změříme qbit - kolabs do některého ze stavů

## 1.2 Více Qbitů

Stav dvou qbitů, z nichž jeden je ve stavu  $|\phi\rangle$  a druhý  $|\psi\rangle$  lze vyjádřit tenzorovým součinem těchto stavů.

$$|\phi\rangle \otimes |\psi\rangle = |\phi\psi\rangle, \quad (1.18)$$

Tento zápis bývá často zkracován do jednoho ketu (1.18). Bazické vektory prostoru dvou qbitů lze získat tenzorovým součinem bazických vektorů pro prostor jednoho qbitu. Pro společný stav dvou qbitů v obecném stavu (1.2) po užití pravidel pro tenzorový součin a zkrácení pomocí (1.18) platí:

$$(\alpha_1 |0\rangle + \beta_1 |1\rangle) \otimes (\alpha_2 |0\rangle + \beta_2 |1\rangle) = \alpha_1 \alpha_2 |00\rangle + \alpha_1 \beta_1 |01\rangle + \beta_1 \alpha_2 |10\rangle + \beta_1 \beta_2 |11\rangle \quad (1.19)$$

Důležitým pozorováním je, že amplitudy tohoto stavu nejsou nezávislé. Vektory jejichž lineární kombinací je tento stav vyjádřen (1.20) většinou se nedokazujeme na rovnici, která bude teprve následovat. Dal bych tu rovnici nekam výše, nebo sem. tvoří bázi čtyřdimenzionálního Hilbertova prostoru dvou qbitů. Tato báze je rozšířením standardní báze na dva qbity a lze ji získat tenzorovým součinem jednotlivých prvků standardní báze. Identickým způsobem lze dále generovat báze pro více qbitů.

$$|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle \quad (1.20)$$

Obdobně lze tenzorovým součinem dvou jedno-qbitových stavů ve vektorové notaci dospět k vektorové notaci pro společný stav dvou qbitů.

$$\begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_1 \alpha_2 \\ \alpha_1 \beta_2 \\ \beta_1 \alpha_2 \\ \beta_1 \beta_2 \end{bmatrix} \quad (1.21)$$

$$\alpha |00\rangle + \beta |01\rangle + \gamma |10\rangle + \delta |11\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \\ \delta \end{bmatrix} \quad (1.22)$$

Zde se ukazuje výhoda braketové notace. Pro systém  $n$  qbitů by vektor byl  $2^n$  dimenzionální, což pro velká  $n$  csechna  $n$  kurzivou značně zneprůjemňuje zápis. Také začíná vyplývat na povrch jedna z výhod kvantových počítačů, k popisu  $n$  qbitů je na klasickém počítači třeba  $2^n$  amplitud. Pro 200 qbitů je potřebný počet amplitud větší, než předpokládaný počet atomů ve vesmíru.

Najít v literatuře počet atomů ve vesmíru...  $\approx 10^{82} - 10^{84}$

Pro operátory působící na jeden qbit platí následující

$$\hat{A} |\phi\rangle \otimes \hat{B} |\psi\rangle = (\hat{A} \otimes \hat{B})(|\phi\rangle \otimes |\psi\rangle), \quad (1.23)$$

tento zápis bývá často zkracován na

$$\hat{A}\hat{B}|\phi\psi\rangle. \quad (1.24)$$

u takového zápisu jeden musí být opatrný, na co to působí. SPese se setkávám s necím jako je

$$(\hat{A} \otimes \hat{B})|\phi\psi\rangle. \quad (1.25)$$

Některé brány pro více qbitů tedy lze získat tenzorovým součinem bran pro jeden qbit. Brána pro  $n$  qbitů bude v maticové reprezentaci odpovídat matici o rozměrech  $2^n \times 2^n$ .

Důležitým poznatkem pro tuto práci je, jak vypadá spektrum tenzorového součinu operátorů. Necht'  $|a\rangle$ ,  $a$  a  $|b\rangle$ ,  $b$  jsou popořadě vlastní vektor a k němu příslušné vlastní číslo operátorů  $\hat{A}$  a  $\hat{B}$ , pak

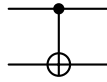
$$\hat{A} |a\rangle \otimes \hat{B} |b\rangle = a |a\rangle \otimes b |b\rangle = ab |ab\rangle = \hat{A}\hat{B} |ab\rangle. \quad (1.26)$$

Vlastní vektory tedy odpovídají tenzorovému součinu vlastních vektorů původních operátorů a vlastní čísla odpovídají součinu příslušných vlastních čísel.

### 1.3 Brány pro více qbitů

Pokud se nemylí, tak vlastně staci jen CNOT a v kombinaci s jedno-qbitovými branami pak můžete zkonstruovat libovolnou 2q branu. Existují ale i více qbitové brány, které nelze vyjádřit jako tenzorový součin bran pro jeden qbit. Velkou skupinu takových bran tvoří *kontrolované brány*. V kontrolované bráně pro dva qbity slouží první jako kontrolní qbit, v závislosti na jeho stavu je pak aplikována na druhý qbit nějaká brána. Příkladem takové brány je například *CNOT* (z anglického Controlled NOT). Jedná se o kontrolovanou  $\hat{X}$  bránu, pokud je stav prvního qbitu  $|1\rangle$ , aplikuje na druhý qbit bránu  $\hat{X}$ . Pokud je stav prvního qbitu  $|0\rangle$ , zůstává stav nezměněn. Jedná se o analogii k bráně XOR (exclusive OR) na klasických počítačích, která však obdobně jako kvantové NOT působí lineárně. Matice brány CNOT má tvar (1.27) a notace pro kvantové obvody je znázorněna na Obr. 1.4.

$$CNOT = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.27)$$



Obr. 1.4: Notace CNOT brány v kvantových obvodech.

**možná sem hodit obecný příklad na použití CNOT.** Kontrolované brány mohou působit i na více qbitů. Obvykle pak aplikují nějakou jedno-qbitovou bránu na poslední qbit, a to právě tehdy pokud všechny předchozí qbity jsou ve stavu  $|1\rangle$ . Příkladem takové brány je *Toffoliho brána*, někdy také nazývána CC-NOT, která operuje na třech qbitech jako kontrolované CNOT. Je zobrazena na 1.6 společně s dalšími často využívanými branami.

#### 1.3.1 Kvantové provázání

Existují i stavy, které nelze rozložit pomocí tenzorového součinu. Takové stavy se nazývají *provázané*. Provázání lze popsat jako určitou korelaci mezi výsledky měření jednotlivých qbitů, kdy měření jednoho qbitu ovlivní stav druhého a měření tak nelze provést nezávisle. Příkladem takových stavů jsou například Bellovy stavy. Na těchto stavech budou stručně popsány důsledky a význam provázání.

#### 1.3.2 Bellovy stavy

-Krátké EPR, historie

-Bellova báze

-Stručně Quantum teleportation

$$|\psi_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) \quad (1.28)$$

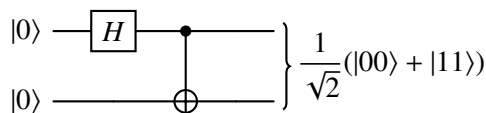
$$|\psi_{01}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle) \quad (1.29)$$

$$|\psi_{10}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle) \quad (1.30)$$

$$|\psi_{11}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle) \quad (1.31)$$

#### 1.3.3 No-clonning theorem

### 1.4 Kvantový paralelismus



Obr. 1.5: Obvod pro vytvoření Bellových stavů.

- vyvrátit popular misconception - kvantové počítače počítají paralelně všechny možnosti
- mohou pracovat se superponovanými stavy, k nim ale nemáme přístup
- nakonec musíme stejně provést projekční měření a systém nám zkolabuje
- výhodu oproti klasickým získáme tak, že se systémem chytře pracujeme a získáme část skryté informace o superpozici
- popsát Deutsche....možná?

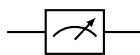
## 1.5 Kvantové obvody

Jak již bylo naznačeno, k provádění složitějších operací na qbitech složením více kvantových bran slouží *kvantové obvody*. **Ja bych to ppsal z opačného konce, tedy že soustava kvantových bran tvoří obvod.** Na rozdíl od klasických logických obvodů jsou kvantové obvody lineární v tom smyslu, že nepovolují žádné smyčky. **To už také není úplně pravda, jsou tu triky za použití tzv. mid-circuit measurement.** Jejich dalšími důležitými vlastnostmi jsou reverzibilita a unitarita, které plynou z faktu, že kvantové obvody jsou pouze sérií unitárních kvantových bran aplikovaných na set qbitů. Z tohoto faktu také plyne možnost vyjádřit kvantový obvod unitární maticí.

Kvantový obvod se sestává z několika částí. Na vstupu obvodu se nachází *kvantový registr*, soubor qbitů na kterých obvod operuje. Poté je zde samotné tělo obvodu které obsahuje jednotlivé kvantové brány. Obvod obsahuje také *klasický registr*, který slouží pro odečítání hodnot z měření.

Obvody zakreslujeme pomocí diagramů, viz např. Obr. 1.5. Obvody čteme zleva a jednotlivé horizontální čáry reprezentují qbity. Do obvodu také zakreslujeme měření, a to pomocí následujícího symbolu.

**Když takto pěkně popisuje obvody, tak napište i co znamená šířka a hloubka kvantového obvodu.**



u obrázku doporučuji vždy nastavit [htb] za figure

### 1.5.1 Parametrizované obvody

## 1.6 Měření na kvantovém počítači













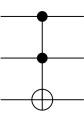
V závislosti na definici pojmu informace lze stav qbitu interpretovat i tak, že jeho pomocí lze kódovat nekonečně množství informace. To však nelze z qbitu žádným způsobem extrahovat, jelikož měřením lze získat pouze některý ze stavů výpočetní báze. Měřením systém navíc zkolabuje do naměřeného stavu.

Měření na kvantovém počítači je vždy ve vztahu k nějaké bázi. Na kvantových počítačích je většinou pro měření užívána standardní báze. Měření qbitu ve standardní bázi matematicky odpovídá aplikaci projekčních operátorů:

$$\hat{P}_0 = |0\rangle\langle 0|, \quad \hat{P}_1 = |1\rangle\langle 1|. \quad (1.32)$$

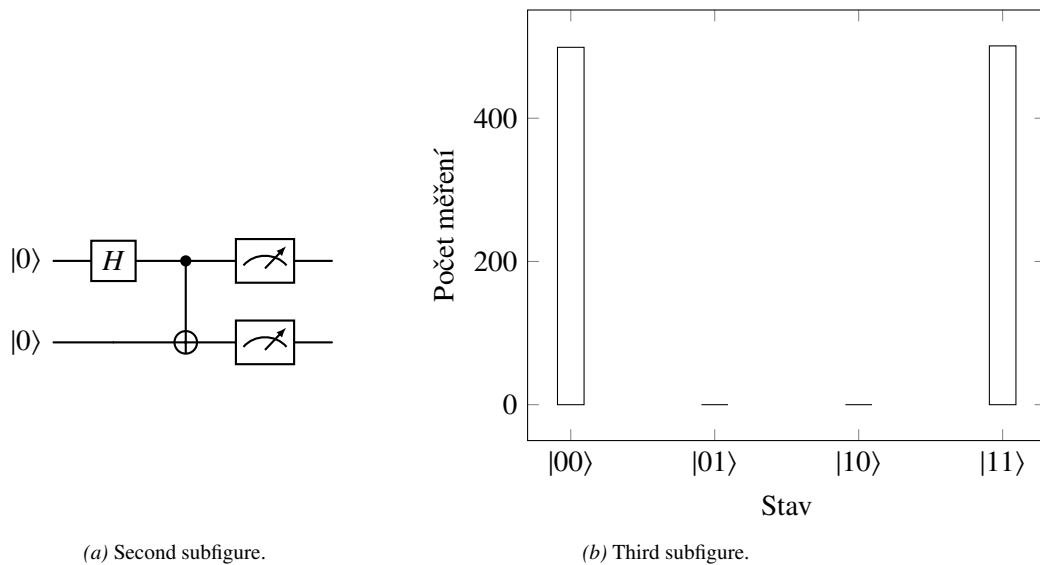
Tyto operace nejsou unitární, nelze je tak interpretovat jako kvantovou bránu. Po měření systém (obvod) **obvod určitě ne. BUď kvantový stav nebo qubit** zkolabuje do naměřeného stavu.

Stav obvodu **obvod určitě ne, ale kvantový stav.** Lze částečně zrekonstruovat pomocí opakovaného měření. Kvůli kolapsu stavu po měření musí být však před každým opakováním qbity v obvodu připraveny do měřeného stavu znovu. Tímto opakovaným měřením je vygenerována distribuce naměřených výsledků.

Operator	Gate(s)		Matrix
Pauli-X (X)			$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$
Pauli-Y (Y)			$\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$
Pauli-Z (Z)			$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
Hadamard (H)			$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$
Phase (S, P)			$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix}$
$\pi/8$ (T)			$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{bmatrix}$
Controlled Not (CNOT, CX)			$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$
Controlled Z (CZ)	 		$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$
SWAP	 		$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$
Toffoli (CCNOT, CCX, TOFF)			$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

Obr. 1.6: ukradeno z [11]

Normalizací této distribuce přibližné pravděpodobnosti naměření jednotlivých prvků standardní báze. Z nich pak lze umocněním získat amplitudy náležící k jednotlivým bazickým stavům.



Obr. 1.7: Placeholder...udělat graf v matplotlib

**Ilustrační příklad toho, že projekci do jiné báze z měření ve standardní bázi prostě nedostaneme:**

Na kvantovém počítači tvořeném jedním qbitem, který nám připravuje systém do neznámého stavu  $|\psi\rangle$  bylo provedeno 100000 měření s následujícími výsledky:

$$|0\rangle : 36000 \quad |1\rangle : 64000.$$

Tedy stav  $|0\rangle$  s pravděpodobností přibližně  $\frac{9}{25}$  a  $|1\rangle$  s pravděpodobností  $\frac{16}{25}$ . Nyní bychom rádi učinili odhad velikosti projekce  $\langle +|\psi\rangle$  s využitím tohoto měření. Stav  $|\psi\rangle$  můžeme aproximovat jako:

$$|\psi\rangle \approx \frac{3}{5} |0\rangle + e^{i\theta} \frac{4}{5} |1\rangle \quad (1.33)$$

Fáze  $e^{i\theta}$  nijak neovlivní pravděpodobnosti naměření  $|0\rangle$  či  $|1\rangle$ , její norma je totiž rovna 1. Nyní použijeme transformační vztahy mezi standardní a Hadamardovou bazí:

$$|0\rangle = \frac{|+\rangle + |-\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |1\rangle = \frac{|+\rangle - |-\rangle}{\sqrt{2}} \quad (1.34)$$

Získáme tak stav  $|\psi\rangle$  ve tvaru:

$$|\psi\rangle = \frac{3 + 4e^{i\theta}}{5\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{3 - 4e^{i\theta}}{5\sqrt{2}} |-\rangle \quad (1.35)$$

Zde ale již Fourierovy koeficienty závisí na fázi  $e^{i\theta}$ . Pravděpodobnost naměření stavu  $|+\rangle$  se tak v závislosti na parametru  $\theta$  může pohybovat mezi  $\frac{2}{100}$  pro  $\theta = \pi$  a  $\frac{98}{100}$  pro  $\theta = 0$ . Tímto měřením jsme tedy nezískali žádnou informaci o zastoupení  $|+\rangle$  a  $|-\rangle$  ve stavu  $\psi$ .

Tento postup je tedy pro měření v jiné než standardní bázi nevhodný. Pro měření v jiné bázi musíme provést dodatečné operace.

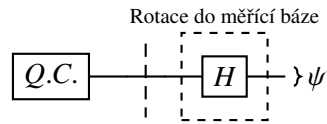
### 1.6.1 Měření v Bázi

-Poro měření v bázi musíme výsledný stav obvodu zrotovat tak, aby báze ve které chceme měřit odpovídala standardní.

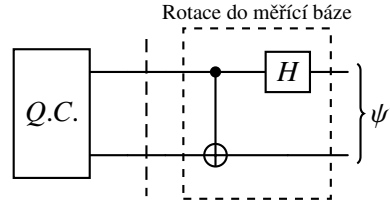
-Lze využít invertibility obvodu a přilepit inverzi obvodu pro vytvoření báze ve které chceme měřit

Hadamardova matice je unitární a symetrická. Její inverze je tedy rovna





Obr. 1.8: Obvod pro měření v Hadamardově bázi. Po aplikaci dodatečného CNOT a H odpovídá naměření  $|0\rangle$  projekci původního obvodu Q.C. do stavu  $|+\rangle$ , obdobně naměření  $|1\rangle$  odpovídá projekci do  $|-\rangle$ .



Obr. 1.9: Obvod pro měření v Bellově bázi.

Často také říkáme, že pro měření provedeme rotaci do Z báze. Z báze představuje standardní bázi (vl. vektory  $\sigma_z$ ).

-Možnost extrahovat informace ze superpozice

-Příklad s fází

-Vysvětlení pomocí diagonalizace

-Vysvětlení pomocí transformace stavů (inverzní obvod k tomu co vytvoří vlastní stavy)

## 1.6.2 Měření operátorů

Měřením operátoru rozumíme získání jeho střední (očekávané) hodnoty. Střední hodnota nás zajímá vždy v nějakém stavu. Jelikož se jedná o veličinu statistického charakteru, probíhá měření iterativně. Na kvantovém počítači připravíme stav, ve kterém nás zajímá střední hodnota operátoru a opakovaně tento stav měříme. Pomocí výsledků těchto měření jsme schopni aproximovat očekávanou hodnotu pozorovatelné.

Poznátky této části jsou pouhou aplikací teorie diagonalizace a spektrálního rozvoje. Důkazy k tvrzením lze nalézt ve většině literatury zabývající se lineární algebrou. ([reference na nějakou knihu...možná modrá smrt?](#))

Pozorovatelné odpovídají Hermitovským operátorům. Jsou tedy diagonalizovatelné a jejich vlastní vektory tvoří kompletní ortogonální bázi. Měření v bázi, ve které je hermitovský operátor (pozorovatelná) diagonální (vlastní/přirozená báze) odpovídá měření ve standardní bázi. Abychom tedy mohli provádět měření (ve std. bázi) musíme pozorovatelné diagonalizovat. To lze provést transformací stavu před měřením. Ilustrujme měření pozorovatelné na kvantovém počítači na následujícím příkladu měření  $\hat{\sigma}_x$ .

Pauliho brána  $X$  je jak unitární, tak hermitovská. Představuje tedy také pozorovatelnou, například v nerelativistické kvantové mechanice ve spinorové reprezentaci pro spin  $1/2$  projekci spinu do osy  $x$ . Tuto pozorovatelnou označujeme  $\hat{\sigma}_x$ .

Mějme stav  $\psi$ , který jsme schopni realizovat na kvantovém počítači. Chceme změřit střední hodnotu  $\hat{\sigma}_x$  v tomto stavu. Střední hodnotu pozorovatelné lze matematicky vyjádřit pomocí "diracova sandwiche":

$$\langle \psi | \hat{\sigma}_x | \psi \rangle = \langle \psi | (\lambda_+ |+\rangle \langle +| + \lambda_- |-\rangle \langle -|) | \psi \rangle = \langle \psi | (|+\rangle \langle +| - |-\rangle \langle -|) | \psi \rangle = \langle + | \psi \rangle^2 - \langle - | \psi \rangle^2. \quad (1.36)$$

Zde v první rovnosti provedeme spektrální rozvoj  $\sigma_x$ . V poslední rovnosti užijeme hermitovskosti skalárního součinu nad  $\mathbb{C}$ .

Problém určení střední hodnoty pozorovatelné jsme tedy převedli na určení velikostí projekcí stavu  $\psi$  do stavů  $|+\rangle$  a  $|-\rangle$ . Tento problém však byl vyřešen v předchozí podkapitole. Stačí stav  $\psi$  zrotovat do správné báze aplikací dodatečné Hadamardovy brány.

$$\langle +|\psi\rangle^2 - \langle -|\psi\rangle^2 = \langle 0|H^\dagger|\psi\rangle^2 - \langle 1|H^\dagger|\psi\rangle^2 = \langle 1|\psi'\rangle^2 - \langle 0|\psi'\rangle^2 \quad (1.37)$$

V tomto případě lze transformaci i "vykoukat" ze znalosti matice přechodu mezi bazí  $|0\rangle, |1\rangle$  a  $|+\rangle, |-\rangle$ .

$$\langle \psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle \psi|\hat{R}^\dagger \hat{D} \hat{R}|\psi\rangle \quad (1.38)$$

$$= \langle \psi|\hat{R}^\dagger \left( \sum_{j=0}^{n-1} \langle j|\hat{D}|j\rangle |j\rangle \langle j| \right) \hat{R}|\psi\rangle \quad (1.39)$$

$$= \sum_{j=0}^{n-1} D_{jj} \langle j|\hat{R}|\psi\rangle^2 = \sum_{j=0}^{n-1} D_{jj} \langle j|\psi'\rangle^2 \quad (1.40)$$

Operátor lze tedy diagonalizovat také přechodem do vlastní báze operátoru. V takovém případě je diagonální matice  $D$  tvořena vlastními čísly a sloupce  $R^\dagger$  odpovídají normalizovaným vlastním vektorům. To při znalosti vlastních hodnot operátoru značně ulehčí výpočet jeho střední hodnoty.

Měření střední hodnoty operátoru  $\hat{A}$  ve stavu  $\psi$  na kvantovém počítači tedy probíhá následujícím způsobem. K obvodu, který připravuje stav  $\psi$  přidáme brány odpovídající  $\hat{R}$ . Počítač tak bude simulovat stav  $|\psi'\rangle = \hat{R}|\psi\rangle$ . Opakovaným měřením získáme distribuci pravděpodobností naměření jednotlivých vektorů standardní měřicí báze  $p_i = \langle i|\psi'\rangle^2$ . Jelikož jsme pomocí rotace  $\hat{R}$  přešli do vlastní báze  $\hat{A}$ , ve které je diagonální, odpovídají vektory standardní měřicí báze vlastním hodnotám  $\hat{A}$ . Střední hodnotu  $\hat{A}$  pak spočítáme jako:

$$\langle \psi|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n \lambda_i p_i \quad (1.41)$$

Tento postup předpokládá znalost vlastních čísel a vektorů operátoru. Ty však k

Střední hodnota pozorovatelné  $\sigma_x$  ve stavu  $|\psi\rangle$  tedy odpovídá měření pozorovatelné  $\sigma_x$  ve stavu  $\hat{X}|\psi\rangle$  ve standardní bázi, tj. užití operátorů  $P_0 = |0\rangle\langle 0|$  a  $P_1 = |1\rangle\langle 1|$ .

Operátor	$\sigma$	$R$	$D$
I	$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	I	I
X	$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	H	Z
Y	$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	$HS^\dagger$	Z
Z	$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$	I	Z

Tab. 1.2: Tabulka popisující diagonalizaci pauliho operátorů.

## 1.7 Simulace na kvantovém počítači

-1 qbit -> 2 stavy  
-2 qbity -> 4 stavy  
-n qbitů ->  $2^n$  stavů

- Nastínit, že při simulaci systému  $n$  částic rostou nároky na kvantový počítač (na počet qbitů) lineárně
- Na klasickém počítači rostou nároky exponenciálně

*Suppose that we try the following guess: that every finite quantum mechanical system can be described exactly, imitated exactly, by supposing that we have another system such that at each point in space-time this system has only two possible base states. Either that point is occupied, or unoccupied—those are the two states. The mathematics of the quantum mechanical operators associated with that point would be very simple.  $a$  — ANNIHILATE  $OCC UN a^* = CREATE = OCC UN$   $0 1 = (ox + io,) 00 n = NUMBER = 1 0 1 = IDENTITY = [ 1 1 476$  Feyninan There would be an operator  $a$  which annihilates if the point is occupied —it changes it to unoccupied. There is a conjugate operator  $a^*$  which does the opposite: if it's unoccupied, it occupies it. There's another operator  $n$  called the number to ask, Is something there? The little matrices tell you what they do. If it's there,  $n$  gets a one and leaves it alone, if it's not there, nothing happens. That's mathematically equivalent to the product of the other two, as a matter of fact. And then there's the identity,  $1$ , which we always have to put in there to complete our mathematics—it doesn't do a damn thing! [5]*

## 1.8 Fyzické kvantové počítače

### 1.8.1 Implementace

### 1.8.2 Šum

## 2 Variační kvantové algoritmy

Zmínit, proč výhodné...využijeme kvantový počítač k tomu, co klasicky moc neumíme a pak klasická optimalizace - tu umíme dobře (viz dnešní neuronové sítě a AI)

Aplikace čerpat převážně z [13] a z článků tam referencovaných.

### 2.1 QAOA

Stručně popsat algoritmus. Moc nezabíhat do detailů. Zmínit, že je vhodné nejprve přečíst podrobný popis VQE a pak se vrátit k QAOA - lepší kontext a pochopení algoritmu.

### 2.2 VQE

Mnoho, nejen fyzikálních problémů, lze převést na hledání vlastních čísel a vektorů nějakého operátoru. Tento typ problémů je řešitelný pomocí algoritmu nazývaného *Quantum Phase Estimation (QPE)*. Tento algoritmus umožňuje získat odhad vlastních hodnot unitárních operátorů (respektive jejich fázi na komplexní jednotkové kružnici). Je založen na QFT ([bud' zkratku rozepsat zde nebo dříve](#)), a tak přináší až exponenciální zrychlení ve srovnání s klasickými algoritmy. QPE je teoreticky dobře popsán [14] [3], avšak k praktické implementaci vyžaduje kvantové počítače s nízkou chybovostí, které nejsme schopni nyní dosáhnout [15]. Vychází tak otázka, zda lze k řešení problému vlastních čísel nějakým způsobem využít dnešních kvantových počítačů, a případně i dosáhnout nějakých výhod vůči klasickým výpočetním metodám.

Možné řešení této otázky poskytuje algoritmus nazývaný *Variational quantum eigensolver*, zkráceně *VQE*. Jedná se o tzv. hybridní algoritmus, tedy algoritmus kombinující užití klasických a kvantových počítačů. Je realizovatelný i na NISQ počítačích a předpokládá se, že by v blízké době mohl dosáhnout kvantové výhody. VQE patří k relativně mladým algoritmům, první popis byl navržen v roce 2014 [1], jeho rozšíření a hlubší teoretický popis pak v roce 2016 [2]. Je tak momentálně aktivně diskutovaným tématem s množstvím publikací (viz např. reference v článku [4], či [8]). Je založen na tzv. *variačním principu* kvantové mechaniky.

#### 2.2.1 Variační princip

Variační princip kvantové mechaniky říká, že střední hodnota pozorovatelné je vždy větší nebo rovna nejmenší vlastní hodnotě této pozorovatelné. Toto tvrzení lze využít k navržení iterativního algoritmu pro získání přibližné hodnoty této nejnižší vlastní hodnoty. To lze speciálně aplikovat na případ energie systému [16].

Mějme Hamiltonián  $\hat{H}$  (či nějakou jinou pozorovatelnou). Důležitým předpokladem je diagonalizovatelnost tohoto operátoru, jeho spektrální rozvoj má pak následující tvar:

$$\hat{H} = \sum_{i=0}^{N-1} E_i |i\rangle \langle i|, \quad (2.1)$$

kde  $N$  odpovídá dimenzi stavového prostoru systému a  $E_i$  je vlastní hodnota příslušná vlastnímu stavu  $|i\rangle$ . Střední hodnotu Hamiltoniánu v obecném (normalizovaném) stavu  $|\psi\rangle$  pak můžeme vyjádřit jako:

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \langle\psi|\left(\sum_{i=0}^{N-1} E_i |i\rangle\langle i|\right)|\psi\rangle \quad (2.2)$$

$$= \sum_{i=0}^{N-1} E_i \langle\psi|i\rangle\langle i|\psi\rangle \quad (2.3)$$

$$= \sum_{i=0}^{N-1} E_i |\langle i|\psi\rangle|^2 \quad (2.4)$$

Položíme-li BÚNO  $E_0 \leq E_i, \forall i \in \mathbb{N}$ , dostáváme následující odhad:

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \sum_{i=0}^{N-1} E_i |\langle i|\psi\rangle|^2 \quad (2.5)$$

$$\geq \sum_{i=0}^{N-1} E_0 |\langle i|\psi\rangle|^2 \quad (2.6)$$

$$= E_0 \sum_{i=0}^{N-1} |\langle i|\psi\rangle|^2 \quad (2.7)$$

$$= E_0 \quad (2.8)$$

Tudíž pro libovolný stav  $|\psi\rangle$  platí:

$$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle \geq E_0. \quad (2.9)$$

Stav  $\psi$  lze parametrizovat jako  $\psi(\vec{\theta})$ . Poté můžeme iterativně měřit střední hodnotu operátoru pro různé parametry  $\vec{\theta}$  a vždy, když nalezneme novou nejnižší střední hodnotu, získáme přesnější svrchní odhad nejnižší vlastní hodnoty  $E_0$ .

Hledání základního stavu operátoru  $\hat{H}$  s nejmenším vlastním číslem  $E_0$  můžeme tedy převést na optimalizační úlohu:

$$\min_{\vec{\theta}} C(\vec{\theta}) = \min_{\vec{\theta}} \langle\psi(\vec{\theta})|\hat{H}|\psi(\vec{\theta})\rangle \geq E_0. \quad (2.10)$$

VQE také řeší toto optimalizační schéma. Simulace stavu  $\psi(\vec{\theta})$  a změření  $\hat{H}$  v tomto stavu probíhá na kvantovém počítači. Následná optimalizace, tj. výpočet nové sady parametrů  $\vec{\theta}$  je pak provedena na počítači klasickém.

## 2.2.2 Quantum phase estimation

Popsat stručně algoritmus, proč v blízké době asi nebude (jsme pořád v NISQ éře :-() -> motivace pro VQE. Nastínit, že ve VQE kvantový počítač pouze pro reprezentaci Hamiltoniánu a jeho měření - jakmile můžeme, tak utečeme ke klasické části algoritmu.

## 2.2.3 Aplikace VQE

[17], [18] Fyzikální, Chemické, Matematické, Finance, Doprava - ideálně dohledat články a tady je oreferencovat.

### 3 VQE

V této kapitole je důkladně popsán základ algoritmu VQE. Nejprve je diskutován algoritmus jako celek. Následně, v jednotlivých podkapitolách jsou rozebrány důkladně jednotlivé součásti algoritmu. Prezentované členění algoritmu je převzato z [4]. Na tento přehledný a obsáhlý souhrnný článek je také doporučen čtenáři k dalšímu studiu. Některé alternativy, či rozšíření algoritmu jsou vysvětleny pouze stručně s odkazem na vhodnou literaturu. Popis je zde zformulován pro Hamiltonián, namísto Hamiltoniánu však může být i libovolná jiná pozorovatelná.

Jak již bylo nastíněno v předchozí kapitole, VQE je hybridní algoritmus, který slouží k nalezení horní závory nejnížší vlastní hodnoty pozorovatelné. Tento odhad je iterativně zlepšován.

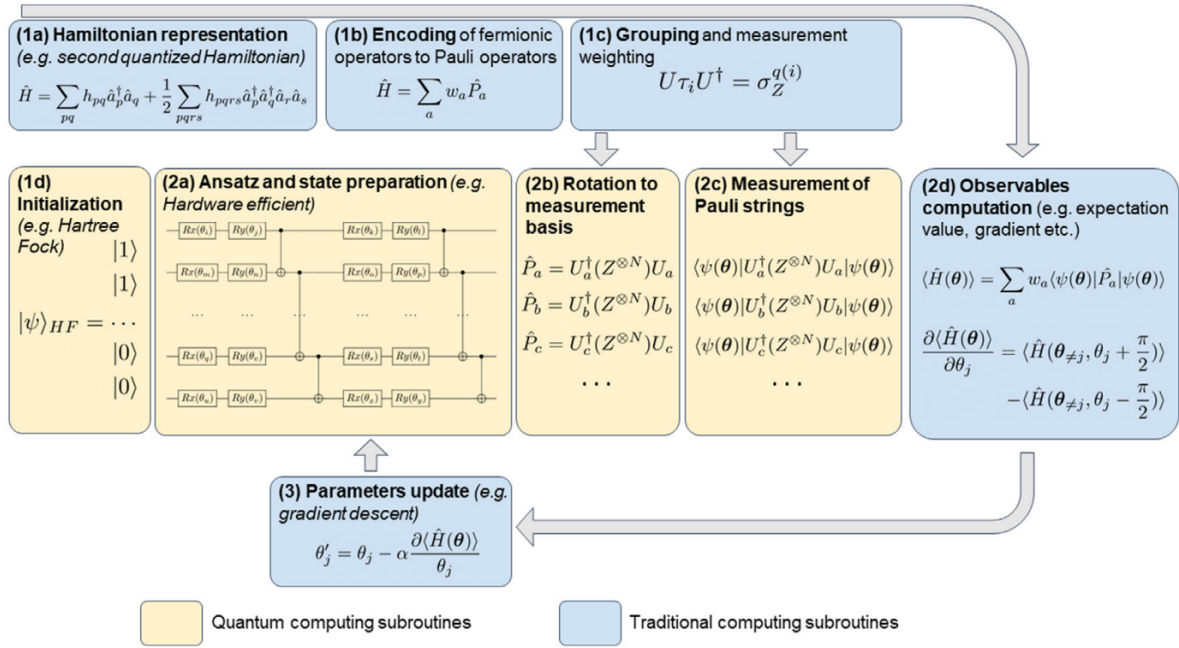
Nechť  $\hat{H}$  je Hamiltonián systému, jehož základní stav je úkolem nalézt. Mějme dále prostor stavů tohoto systému parametrizován pomocí souboru parametrů  $\vec{\theta}$  a odhad základního stavu s parametry  $\vec{\theta}_0$ . V jedné iteraci VQE proběhne výpočet střední hodnoty  $\hat{H}$  v stavu s parametry  $\vec{\theta}_0$ , následně je použita nějaká klasická optimalizační metoda, která nalezne novou sadu parametrů  $\vec{\theta}_1$ , pro níž je střední hodnota  $\hat{H}$  nižší a stav daný těmito parametry tedy lépe aproximuje základní stav. Pro výpočet nových parametrů je třeba určit očekávanou hodnotu  $\hat{H}$  i pro parametry v okolí  $\vec{\theta}_0$ , k čemuž je také použit kvantový počítač. Získaná sada parametrů  $\vec{\theta}_1$  je následně užita v další iteraci jako prvotní odhad. VQE je tudíž heuristický algoritmus, není vždy garantováno dosažení globálního minima v prostoru optimalizovaných parametrů a tedy získání správného výsledku.

Motivaci k užití kvantového počítače pro reprezentaci stavu a měření Hamiltoniánu v tomto stavu lze nahlédnout na jednoduchém příkladu. Mějme soustavu  $N$  částic, z nichž každá má 2 vlastní stavy, například částice se spinem  $1/2$ . Jedna částice je tedy popsána dvoudimenzionálním Hilbertovým prostorem. Soustava  $N$  částic bude pak popsána tenzorovým součinem těchto 2D prostorů. Jednu částici v tomto případě lze popsat pomocí jednoho qbitu. Pro popis  $N$  částic tak bude třeba  $N$  qbitů. Avšak Hilbertův prostor popisující soustavu  $N$  částic bude  $2^N$ -dimenzionální. Při popisu na klasickém počítači by tedy bylo třeba pro kompletní popis systému  $2^N$  amplitud, tedy se jedná o problém s exponenciální náročností. Jednou s největších výhod VQE tak je škálovatelnost vůči velikosti systému.

VQE však nepřináší exponenciální výhodu. Důvodem je fakt, že Hamiltonián musí být nejprve rozložen na součet tzv. *Pauliho řetězců* jejichž počet je řádu  $O(\text{poly}(N))$ . Důvod k tomuto rozkladu bude popsán níže. K určení očekávané hodnoty Hamiltoniánu bude tedy s užitím kvantového počítače třeba  $O(\text{poly}(N))$  operací, při výpočtu na klasickém počítači by oblo operací třeba  $O(2^N)$ . VQE tedy může mít až polynomiální výhodu.

#### 3.1 Popis algoritmu

V této části bude VQE rozdělen na několik částí, které budou dále důkladně rozebrány. Názorné schéma algoritmu lze nalézt na Obr. 3.1. Nejprve je třeba vyjádřit řešený problém pomocí Hamiltoniánu. Ten je pak enkódován pomocí Pauliho operátorů tak, aby mohl být reprezentován na kvantovém počítači. Následně je vytvořen parametrizovaný kvantový obvod, tzv. *ansatz*, který z výchozího stavu (např.  $|0\rangle^{\otimes N}$ ) vytvoří parametrizovaný stav, který alespoň částečně pokrývá prostor zkoumaného Hamiltoniánu. V tomto parametrizovaném stavu bude probíhat měření Hamiltoniánu realizované rotací do báze ve které je Hamiltonián diagonální a opakovaným projekčním měřením. Určená očekávaná hodnota je pak vy-



Obr. 3.1: Shrnutí VQE, ukradeno z [4], ideálně PŘEKRESLIT do vektoru a udělat hezčí.

užita k získání nových parametrů ansatzu pomocí klasického *optimizéru*. Následuje stručný popis částí diagramu na Obr. 3.1.

- **Reprezentace Hamiltoniánu:** Problém je třeba nejprve formulovat jako úlohu na hledání základního stavu. Dále je třeba zvolit vhodnou bázi, ve které bude vyjádřen Hamiltonián zkoumaného systému. Častou volbou pro sféricky symetrické systémy bývají například bazické funkce tvořené kulovými (někdy nazývané sférické harmonické) funkcemi násobené radiálními funkcemi. Pro více částicové systémy bývá báze často vytvořena z jednočásticových bazických funkcí. Další vlastností, kterou musí reprezentace reflektovat je symetrie, resp. antisymetrie systému vůči výměně částic. Například systém fermionů (elektronový obal atomu, nukleony v jádře atd.) musí být vůči záměně dvou částic antisymetrický. Existují de facto dvě možnosti, jak toho dosáhnout. První z nich je tuto antisymetrii vynutit ve vlnových funkcích, druhou možností je ji realizovat definicí operátorů. Tyto dvě reprezentace se popořadě nazývají první a druhé kvantování, tyto názvy mají historický původ. Pro VQE bývá Hamiltonián obvykle reprezentován pomocí druhého kvantování. Hamiltonián je tak vyjádřen pomocí kreačních operátorů  $\hat{a}_j^\dagger$  a anihilačních operátorů  $\hat{a}_j$ , jejichž působení odpovídá přidání respektive odebrání částice v  $j$ -tém stavu (tj. stavu popsáném  $j$ -tou bazickou funkcí). Antisymetrie je pak vynucena antikomutačními relacemi těchto operátorů.
- **Enkódování Hamiltoniánu:** Dále je třeba Hamiltonián nějakým způsobem enkódovat tak, aby jej bylo možno měřit na kvantovém počítači. Toho je docíleno vyjádřením hamiltoniánu pomocí Pauliho řetězců pro  $N$  qbitů  $\hat{P}_i \in \{I, X, Y, Z\}^{\otimes N}$ . To je možné mimo jiné proto, že Pauliho operátory spolu s jednotkou tvoří bázi operátorů na daném prostoru. Hamiltonián má tak tedy podobu lineární kombinace  $\hat{P}_i$ . Jednotlivé Pauliho řetězce pak lze vyjádřit jako kvantové obvody. V prvním kvantování je mapování provedeno přímou ekvivalencí bazických stavů a výpočetní bazí kvantového počítače. Projekční operátory tak jsou vyjádřeny pomocí Pauliho operátorů. V druhém kvantování jsou kreační a anihilační operátory zobrazeny na kombinace Pauliho operátorů, a to takovým způsobem, aby byla zachována případná antisymetrie fermionických systémů. Příklady dvou takových zobrazení jsou Jordan-Wigner [19] a Bravyi-Kitaev [20] transformace, které jsou zároveň nejpoužívanějšími.
- **Strategie měření:** Měření operátorů (viz kapitola 1.6.2) probíhá rotací stavů do báze, ve které je operátor diagonální. Hamiltonián je ve VQE vyjádřen pomocí Pauliho operátorů, pro které jsou diagonalizace známe. Linearita střední hodnoty umožňuje rozdělit měření střední hodnoty Hamil-

toniánu na měření středních hodnot Pauliho řetězců z rozkladu v předchozím kroku. Tato rotace do báze je realizována kvantovým obvodem (viz 1.2), kterým bude transformován stav ve kterém probíhá měření. Opakovaným projekčním měřením tohoto zrotovaného stavu je získána pravděpodobnostní distribuce, a z ní již lze určit očekávané hodnoty Pauliho řetězců. Měření lze dále zefektivnit, některé řetězce jsou totiž diagonalizovatelné současně a jejich střední hodnotu lze určit pomocí stejné pravděpodobnostní distribuce. Takové řetězce budou vzájemně komutovat, a tak lze využít vlastností Lieovy algebry Pauliho matic k jejich identifikaci. Tato seskupení jsou netriviální a existuje jich mnoho, identifikace optimálního seskupení je předmětem současného výzkumu [21], [22], [23], [24].

- **Ansatz:** Hlavní podstatou VQE je procházení Hilbertova prostoru Hamiltoniánu pomocí parametrizovaných stavů. Optimalizací parametrů je pak nalezeno (přibližné) minimum střední hodnoty Hamiltoniánu. Toto minimum pak představuje odhad energie základního stavu, jehož odhad je získán dosažením parametrů pro nalezené minimum. Kvantový obvod, který tento stav připravuje je nazýván *ansatz*. Ansatz do velké míry ovlivňuje náročnost a přesnost VQE. Kvalitu ansatzu vyjadřuje to, jak dobře dokáže obsáhnout Hilbertův prostor zkoumaného Hamiltoniánu a to, jak dobře trénovatelný (tj. jak rychle, jak přesně a zda vůbec lze nalézt minimum). Pokrytí stavového prostoru by mělo být dostatečné, aby bylo garantováno, že bude dobrým modelem základního stavu, zároveň však musí být mohutnost ansatzu v souladu s možnostmi současných kvantových počítačů a optimalizačních metod. V praxi může být volba ansatzu motivována buď konkrétním fyzikálním problémem, či hardwarem kvantového počítače. V první možnosti ansatz zaveden v souladu se známými stavy Hamiltoniánu. V druhé možnosti je zase navržen tak, aby jej bylo možné optimálně realizovat na daném kvantovém hardwaru.
- **Optimalizace parametrů:** V závěru jedné iterace je třeba určit parametry ansatzu pro další iteraci. Optimalizace parametrů je již čistě klasická část VQE. Výběr optimizéru nicméně značně ovlivňuje přesnost, úspěšnost i náročnost algoritmu. Optimizér udává, kolik měření je nutno v jedné iteraci provést a také, kolik iterací je třeba k dosažení konvergence. Optimizéry bývají často navrženy specificky tak, aby kontrovaly různé optimalizační problémy, například sedla v optimalizační krajině, či velké množství lokálních minim. Optimizérů existuje velké množství [25] a správný výběr je esenciální pro efektivní fungování VQE.

## 3.2 Enkódování Hamiltoniánu

Před řešením problému pomocí VQE je třeba nejprve formulovat Hamiltonián s tímto problémem spojený. Z principu korespondence lze v kvantové mechanice vyjádřit Hamiltonián analogicky s klasickou mechanikou [16]. Tedy pro potenciál nezávislý na hybnostech jako součet kinetické a potenciální energie:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}, \quad (3.1)$$

pro  $N$  částic má v souřadnicové reprezentaci operátor kinetické energie tvar:

$$\hat{T} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} = - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla^2. \quad (3.2)$$

Potenciál je specifický pro každý systém a jeho správná volba je základem dobrého popisu. V tomto kroku často dochází k aproximacím, které zjednodušují řešení. Tyto aproximace mohou mít různou podobu. Například rozdělení Hamiltoniánu na součet několika členů, kde je interakce mezi těmito členy zanedbána. Příkladem je například Born-Oppenheimer aproximace pro molekulární Hamiltoniány [26], ve které je uvažována kinetická energie pouze elektronového obalu a potenciál je rozdělen na coulombický interakční člen párů elektron-elektron a interakční člen párů elektron-nukleon. Je tak uvažována vždy pouze interakce dvou částic. Dále mohou být zahrnuty také spinové, vibrační či rotační členy.

Další, velmi častou aproximací je nahrazení vzájemné interakce částic globálním potenciálem. Bývá používána například pro jaderné modely nebo dále rozebírané vektorové mezony. Z pohledu jedné částice tak interakce s ostatními částicemi odpovídá uvěznění v potenciálové jámě. Potenciál bývá často sférický



symetrický a nejjednoduššími volbami jsou sféricky symetrická jáma, pole izotropního harmonického oscilátoru  $V \propto r^2$  a analogie Coloumbického potenciálu  $V \propto \frac{1}{r}$ .

### 3.2.1 Částice ve sféricky symetrickém potenciálu

Sférická symetrie umožňuje značné zjednodušení řešení Schrödingerovy rovnice. Křešení lze postupovat vícero způsoby například čistě matematicky, užitím separace proměnných, nebo více fyzikálně, hledáním vlastních stavů úplné množiny pozorovatelných  $\{\hat{L}^2, \hat{L}_3, \hat{H}\}$ . Hamiltonián je pak součtem radiální a úhlové části, výsledné vlnové funkce jsou zase součinem radiálně závislé a úhlově závislé části. Úhlová část odpovídá vlastním stavům  $\hat{L}^2$ . Radiální část vlnové funkce je řešením jednodimenzionální Schrödingerovy rovnice pro částici v efektivním potenciálu  $\hat{V}_{\text{eff}} = \hat{V} + \frac{\hbar^2 j(j+1)}{2mr^2}$ , kde  $\hat{V}$  je původní potenciál [16].

[Naznačit řešení, odkázat se na \[16\]](#)

### 3.2.2 Nerozlišitelné částice

Kvantové částice stejného druhu jsou nerozlišitelné. Každá z nich tedy musí být popsána stejnou sadou vlnových funkcí řešících jednočásticovou Schrödingerovu rovnici. Společný stav systému více nerozlišitelných částic pak bude popsán tenzorovým součinem těchto jednočásticových stavů. Dle tzv. *symetrizačního postulátu* lze rozdělit do dvou skupin podle chování jejich společné vlnové funkce při záměně dvou částic. Vlnová funkce je symetrická pro *bosony* a antisymetrická pro *fermiony*. Je-li tedy  $|\psi\rangle$  množina normalizovaných stavů pro jednu částici, platí pro dvě nerozlišitelné částice následující:

$$|\psi_1, \psi_2\rangle = \xi |\psi_2, \psi_1\rangle, \quad (3.3)$$

kde  $\xi = 1$  pro bosony a  $\xi = -1$  pro fermiony. Společný stav takových dvou částic tedy musí mít tvar:

$$|\psi_1, \psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle + \xi |\psi_2\rangle \otimes |\psi_1\rangle), \quad (3.4)$$

kde opět  $\xi = 1$  pro bosony a  $\xi = -1$  pro fermiony. Pro vlnovou funkci v poziční bázi platí:

$$\psi(x_1, x_2) = \langle x_1, x_2 | \psi_1, \psi_2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle x_1 | \psi_1 \rangle \langle x_2 | \psi_2 \rangle + \xi \langle x_1 | \psi_2 \rangle \langle x_2 | \psi_1 \rangle) \quad (3.5)$$

Společný stav pro  $N$  nerozlišitelných částic má obecně tvar [27]:

$$|\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle = \sqrt{\frac{\prod_{i=1}^N n_i!}{N!}} \sum_{\mathcal{P}} \xi^{\frac{1}{2} \text{sgn}(\mathcal{P})} |\psi_{\mathcal{P}_1}\rangle \otimes |\psi_{\mathcal{P}_2}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{\mathcal{P}_N}\rangle, \quad (3.6)$$

kde  $n_i$  představuje počet částic v daném stavu. Pro fermiony tedy  $n_i \in \{0, 1\}$ , sumace probíhá přes všechny možné permutace a  $\text{sgn}(\mathcal{P})$  je znaménko dané permutace. V případě fermionů je tento společný stav  $N$  částic znám jako tzv. *Slaterův determinant*. Tento způsob vynucení (anti)symetrie definicí vlnové funkce bývá nazývaný *první kvantování*. Alternativní popis, nazývaný *druhé kvantování* (anti)symetrii vynucuje vhodnou definicí operátorů.

### 3.2.3 První kvantování

V prvním kvantování jsou stavy systému  $N$  částic popsány pomocí definice (3.6). Mapování [28]

### 3.2.4 Druhé kvantování

Popisuje přepis Hamiltoniánu do tzv. notace obsazovacích čísel.

Mějme  $N$  částic.  $n_i$  odpovídá počtu částic ve stavu  $i$ . Libovolný stav  $\mathcal{F}^N$  lze zapsat následující superpozicí

$$|\psi\rangle = \sum_{\sum n_i = N} C_{n_1, n_2, \dots} |n_1, n_2, \dots\rangle \quad (3.7)$$

Prostor  $\mathcal{F} = \otimes_{N=0}^{\infty} F^N$  je Fockův prostor...libovolný počet částic.  $\{|n_1, n_2, \dots\rangle\}$  je báze. Libovolný vektor:

$$|\psi\rangle = \sum_{n_1, n_2, \dots} C_{n_1, n_2, \dots} |n_1, n_2, \dots\rangle \quad (3.8)$$

Definujeme posunovací operátory

$$a_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} \xi^{s_i} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle \quad (3.9)$$

Bázi lze vygenerovat

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \prod_i \frac{1}{\sqrt{n_i!}} (a_i^\dagger)^{n_i} |0\rangle \quad (3.10)$$

Lze odvodit, že

$$a_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i} \xi^{s_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle \quad (3.11)$$

Přejdeme k od čísel k  $\lambda$ . Operátor  $\hat{a}_\lambda^\dagger$  vytvoří částici ve stavu  $\lambda$

### 3.2.4.1 Reprezentace jednočásticových operátorů

Jednočásticový operátor často ve tvaru:

$$\hat{O} = \sum_{n=1}^N \hat{o}_n, \quad (3.12)$$

je jím např. nerelativistická kinetická energie  $\hat{T} = \sum \frac{\hat{p}^2}{2m}$  Zavádíme operátor počtu částic

$$\hat{n}_\lambda = \hat{a}_\lambda^\dagger \hat{a}_\lambda \quad (3.13)$$

-Jordan-Wigner [19], Bravyi-Kitaev [20]

## 3.2.5 Jordan-Wiegnero transformace

## 3.3 Ansatz

citace - [29]

## 3.4 Měření

### 3.4.1 Pauliho řetězce

### 3.4.2 Diagonalizace

### 3.4.3 Seskupení

## 3.5 Optimizéry

### 3.5.1 Gradientní

-Adam [30]

### 3.5.2 Negradientní

-Nelder-Mead [31], Powel [32], rotosolve [33]

## 3.6 Modifikace a budoucnost

### 3.6.1 Paralelizace

The potential for parallelization of the VQE was already identified in the initial paper by Peruzzo et al. [37] and subsequently mentioned in many VQE papers, although an in-depth study is lacking. Parallelism is however critical for the viability of the method. Parallelism of the VQE offers a direct way to convert runtime cost into hardware cost by splitting the shots required onto different sets of qubits (which can be arranged in different threads on a single quantum computer, or multiple, disconnected quantum computers). To illustrate this point, we adapt the estimates presented in Table 2 assuming that perfect parallelization is possible, and present the results in Table 3. It is clear that parallelization will be a critical part of any future success of the VQE method. Broad availability of quantum computers with increasing number of qubits could therefore significantly speed-up the VQE process, however there are significant caveats to that. One key observation is that full parallelization would require a number of quantum computers cores (or threads) that scales  $O(pN^4/2)$ , with  $p$  the number of parameters in the ansatz. This could clearly be a prohibitive number for large computation given the current state of hardware technology, and it is possible that fault-tolerant technology could arrive before we are able to produce such large quantities of devices. Even if it was possible to build large quantities of quantum computers, there are many caveats to the potential of parallelization for the VQE. First, as it is the case for conventional parallel computing, parallel quantum computing will suffer from communication overheads. These overheads are the computational cost of coordinating the parallel tasks, which can include the likes of synchronization cost, data aggregation and communication (possibly latency if the different sets of qubits are connected through the cloud). Second, parallelization could result in higher noise levels. We note two possible sources of additional noise: (1) if parallelization is done on multi-threaded quantum computers, there is higher chance of cross-talk between qubits; (2) variational algorithms are considered to be somewhat noise resilient as they can learn the systematic biases of a given hardware [38,94] — if the algorithm is run on multiple quantum computers these noise resilient effects may disappear, as systematic biases on one set of qubits, which differs on another, may no longer be learned through the variational process.

### 3.6.2 Excitované stavy

### 3.6.3 Folded Spectrum VQE

### 3.6.4 Cascaded VQE

## **4 Kvarkonia (Vektorové mezony)**

## **Část II**

# **Praktická část**

## **Závěr**

To be continued....

## Bibliografie

1. PERUZZO, Alberto; MCCLEAN, Jarrod; SHADBOLT, Peter; YUNG, Man-Hong; ZHOU, Xiao-Qi; LOVE, Peter J.; ASPURU-GUZI, Alán; O'BRIEN, Jeremy L. A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor. *Nature Communications* [online]. 2014, vol. 5, no. 1, s. 4213 [cit. 2024-05-01]. issn 2041-1723. Dostupné z dor: 10.1038/ncomms5213. Publisher: Nature Publishing Group.
2. MCCLEAN, Jarrod R.; ROMERO, Jonathan; BABBUS, Ryan; ASPURU-GUZI, Alán. The theory of variational hybrid quantum-classical algorithms. *New Journal of Physics* [online]. 2016, vol. 18, no. 2, s. 023023 [cit. 2024-05-01]. issn 1367-2630. Dostupné z dor: 10.1088/1367-2630/18/2/023023. Publisher: IOP Publishing.
3. NIELSEN, Michael A.; CHUANG, Isaac L. *Quantum computation and quantum information*. 10th anniversary edition. Cambridge: Cambridge university press, 2010. isbn 978-1-107-00217-3.
4. TILLY, Jules; CHEN, Hongxiang; CAO, Shuxiang; PICOZZI, Dario; SETIA, Kanav; LI, Ying; GRANT, Edward; WOSSNIG, Leonard; RUNGGER, Ivan; BOOTH, George H.; TENNYSON, Jonathan. The Variational Quantum Eigensolver: A review of methods and best practices. *Physics Reports* [online]. 2022, roč. 986, s. 1–128 [cit. 2024-04-01]. issn 0370-1573. Dostupné z dor: 10.1016/j.physrep.2022.08.003.
5. FEYNMAN, Richard P. Simulating physics with computers. *International Journal of Theoretical Physics* [online]. 1982, vol. 21, no. 6, s. 467–488 [cit. 2024-05-01]. issn 1572-9575. Dostupné z dor: 10.1007/BF02650179.
6. FEYNMAN, Richard P. Quantum mechanical computers. *Foundations of Physics* [online]. 1986, vol. 16, no. 6, s. 507–531 [cit. 2024-03-19]. issn 1572-9516. Dostupné z dor: 10.1007/BF01886518.
7. NIELSEN, M. The Fermionic canonical commutation relations and the Jordan-Wigner transform. In: [online]. 2005 [cit. 2024-03-19]. Dostupné z: <https://www.semanticscholar.org/paper/The-Fermionic-canonical-commutation-relations-and-Nielsen/18341dd1f056fdcad2ebf4ea2df59db522e041f6>.
8. TAZI, Lila Cadi; THOM, Alex J. W. Folded Spectrum VQE : A quantum computing method for the calculation of molecular excited states. *Journal of Chemical Theory and Computation* [online]. 2024, roč. 20, č. 6, s. 2491–2504 [cit. 2024-04-30]. issn 1549-9618, issn 1549-9626. Dostupné z dor: 10.1021/acs.jctc.3c01378.
9. STECHLY, Michal. *Introduction to Variational Quantum Algorithms* [online]. arXiv, 2024 [cit. 2024-03-19]. Č. arXiv:2402.15879. Dostupné z dor: 10.48550/arXiv.2402.15879.
10. AUTHORS, various. *Qiskit Textbook*. Github, 2023. Dostupné také z: <https://github.com/Qiskit/textbook>.
11. RXTREME. *Quantum Logic Gates*. Wikimedia Commons, [b.r.]. Dostupné také z: [https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/e/e0/Quantum\\_Logic\\_Gates.png](https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/e/e0/Quantum_Logic_Gates.png).
12. LIU, C.; LIU, K. *The Three-Body Problem*. Tor Publishing Group, 2014. isbn 9780765377067. Dostupné také z: <https://books.google.cz/books?id=QxbFBAAQBAJ>.
13. CERESO, M.; ARRASMITH, Andrew; BABBUS, Ryan; BENJAMIN, Simon C.; ENDO, Suguru; FUJII, Keisuke; MCCLEAN, Jarrod R.; MITARAI, Kosuke; YUAN, Xiao; CINCIO, Lukasz; COLES, Patrick J. Variational Quantum Algorithms. *Nature Reviews Physics* [online]. 2021, roč. 3, č. 9, s. 625–644 [cit. 2024-05-02]. issn 2522-5820. Dostupné z dor: 10.1038/s42254-021-00348-9.
14. KITAEV, A. Yu. Quantum measurements and the Abelian Stabilizer Problem [online]. 1995, č. arXiv:quant-ph/9511026 [cit. 2024-07-08]. Dostupné z dor: 10.48550/arXiv.quant-ph/9511026.
15. MOHAMMADBAGHERPOOR, Hamed; OH, Young-Hyun; DREHER, Patrick; SINGH, Anand; YU, Xianqing; RINDOS, Andy J. An Improved Implementation Approach for Quantum Phase Estimation on Quantum Computers [online]. 2019, č. arXiv:1910.11696 [cit. 2024-07-08]. Dostupné z dor: 10.48550/arXiv.1910.11696.
16. SHANKAR, R. *Principles of Quantum Mechanics* [online]. New York, NY: Springer US, 1994 [cit. 2024-07-11]. isbn 978-1-4757-0578-2. Dostupné z dor: 10.1007/978-1-4757-0578-2.
17. BHOY, Bharti; STEVENSON, Paul. *Shell-model study of  $^{58}\text{Ni}$  using quantum computing algorithm* [online]. arXiv, 2024 [cit. 2024-07-12]. Č. arXiv:2402.15577. Dostupné z dor: 10.48550/arXiv.2402.15577. version: 2.
18. KISS, Oriol; GROSSI, Michele; LOUGOVSKI, Pavel; SANCHEZ, Federico; VALLECOSA, Sofia; PAPENBROCK, Thomas. Quantum computing of the  $^6\text{Li}$  nucleus via ordered unitary coupled clusters. *Physical Review C* [online]. 2022, roč. 106, č. 3, s. 034325 [cit. 2024-07-12]. issn 2469-9985, issn 2469-9993. Dostupné z dor: 10.1103/PhysRevC.106.034325.
19. JORDAN, P.; WIGNER, E. Über das Paulische Äquivalenzverbot. *Zeitschrift für Physik* [online]. 1928, Jg. 47, Nr. 9, s. 631–651 [cit. 2024-07-10]. issn 0044-3328. Dostupné z dor: 10.1007/BF01331938.
20. BRAVYI, Sergey; KITAEV, Alexei. Fermionic quantum computation. *Annals of Physics* [online]. 2002, roč. 298, č. 1, s. 210–226 [cit. 2024-07-10]. issn 00034916. Dostupné z dor: 10.1006/aphy.2002.6254.
21. GOKHALE, Pranav; ANGIULI, Olivia; DING, Yongshan; GUI, Kaiwen; TOMESH, Teague; SUCHARA, Martin; MARTONOSI, Margaret; CHONG, Frederic T. *Minimizing State Preparations in Variational Quantum Eigensolver by Par-*

- tioning into Commuting Families [online]. arXiv, 2019 [cit. 2024-07-10]. Č. arXiv:1907.13623. Dostupné z dor: 10.48550/arXiv.1907.13623. version: 1.
22. HUGGINS, William J.; MCCLEAN, Jarrod R.; RUBIN, Nicholas C.; JIANG, Zhang; WIEBE, Nathan; WHALEY, K. Birgitta; BABBUSH, Ryan. Efficient and noise resilient measurements for quantum chemistry on near-term quantum computers. *npj Quantum Information* [online]. 2021, vol. 7, no. 1, s. 1–9 [cit. 2024-07-10]. issn 2056-6387. Dostupné z dor: 10.1038/s41534-020-00341-7. Publisher: Nature Publishing Group.
  23. HAMAMURA, Ikko; IMAMICHI, Takashi. Efficient evaluation of quantum observables using entangled measurements. *npj Quantum Information* [online]. 2020, vol. 6, no. 1, s. 1–8 [cit. 2024-07-10]. issn 2056-6387. Dostupné z dor: 10.1038/s41534-020-0284-2. Publisher: Nature Publishing Group.
  24. GOKHALE, Pranav; CHONG, Frederic T.  $\mathcal{O}(N^3)$  Measurement Cost for Variational Quantum Eigensolver on Molecular Hamiltonians [online]. 2019, č. arXiv:1908.11857 [cit. 2024-05-06]. Dostupné z dor: 10.48550/arXiv.1908.11857.
  25. BONET-MONROIG, Xavier; WANG, Hao; VERMETTEN, Diederick; SENJEAN, Bruno; MOUSSA, Charles; BÄCK, Thomas; DUNJKO, Vedran; O'BRIEN, Thomas E. Performance comparison of optimization methods on variational quantum algorithms. *Physical Review A* [online]. 2023, roč. 107, č. 3, s. 032407 [cit. 2024-04-01]. Dostupné z dor: 10.1103/PhysRevA.107.032407. Publisher: American Physical Society.
  26. BORN, M.; OPPENHEIMER, R. Zur Quantentheorie der Molekeln. *Annalen der Physik* [online]. 1927, vol. 389, no. 20, s. 457–484 [cit. 2024-07-12]. issn 1521-3889. Dostupné z dor: 10.1002/andp.19273892002. \_eprint: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/andp.19273892002>.
  27. ZHANG, J. M.; SONG, H. F.; LIU, Y. Permanent variational wave functions for bosons. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* [online]. 2022, roč. 599, s. 127399 [cit. 2024-07-12]. issn 03784371. Dostupné z dor: 10.1016/j.physa.2022.127399.
  28. ABRAMS, Daniel S.; LLOYD, Seth. Simulation of Many-Body Fermi Systems on a Universal Quantum Computer. *Physical Review Letters* [online]. 1997, roč. 79, č. 13, s. 2586–2589 [cit. 2024-07-12]. Dostupné z dor: 10.1103/PhysRevLett.79.2586. Publisher: American Physical Society.
  29. SIM, Sukin; JOHNSON, Peter D.; ASPURU-GUZI, Alan. Expressibility and entangling capability of parameterized quantum circuits for hybrid quantum-classical algorithms. *Advanced Quantum Technologies* [online]. 2019, roč. 2, č. 12, s. 1900070 [cit. 2024-07-12]. issn 2511-9044, issn 2511-9044. Dostupné z dor: 10.1002/qute.201900070.
  30. KINGMA, Diederik P.; BA, Jimmy. *Adam: A Method for Stochastic Optimization* [online]. arXiv, 2017 [cit. 2024-07-10]. Č. arXiv:1412.6980. Dostupné z dor: 10.48550/arXiv.1412.6980. version: 9.
  31. NELDER, J. A.; MEAD, R. A Simplex Method for Function Minimization. *The Computer Journal* [online]. 1965, roč. 7, č. 4, s. 308–313 [cit. 2024-07-10]. issn 0010-4620. Dostupné z dor: 10.1093/comjnl/7.4.308.
  32. POWELL, M. J. D. An efficient method for finding the minimum of a function of several variables without calculating derivatives. *The Computer Journal* [online]. 1964, roč. 7, č. 2, s. 155–162 [cit. 2024-07-10]. issn 0010-4620. Dostupné z dor: 10.1093/comjnl/7.2.155.
  33. OSTASZEWSKI, Mateusz; GRANT, Edward; BENEDETTI, Marcello. Structure optimization for parameterized quantum circuits. *Quantum* [online]. 2021, roč. 5, s. 391 [cit. 2024-07-10]. issn 2521-327X. Dostupné z dor: 10.22331/q-2021-01-28-391.