

# Optimalizácia variačných kvantových eigensolverov

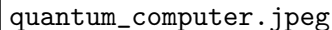
Michal Švec

doc. RNDr. Martin Plesch, PhD.

December 6, 2023

# Kvantové počítače

- riadia sa zákonmi kvantovej mechaniky
  - opisuje správanie mirkoskopických systémov ako fotóny, elektróny, atómy, molekuly...
- pravdepodobnostný výpočtový model
- využitie paralelizmu
- niektoré problémy dokážu vyriešiť rýchlejšie ako štandardné počítače
- v súčasnosti ešte nie sú veľmi užitočné
  - najväčší problém predstavuje šum a malý počet qubitov
- $-273.15^{\circ}\text{C}$  (0K)



quantum\_computer.jpeg

# Bit vs. qubit

## Bit (**b**inary **dig**it)

- najmenšia jednotka informácie v štandardnom počítači
- môže byť v dvoch rôznych stavoch, 0 a 1
- stav sa po meraní nezmení
- môžeme kopírovať
- booleovská algebra

## Qubit (quantum bit)

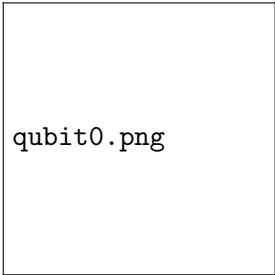
- najmenšia jednotka informácie v kvantovom počítači
- môže byť v stave  $|0\rangle$ ,  $|1\rangle$  alebo v akomkoľvek stave, ktorý je lineárnou kombináciou dvoch stavov s komplexnými koeficientami
- stav sa po meraní zmení na jeden z dvoch stavov  $|0\rangle$  alebo  $|1\rangle$
- nemôžeme kopírovať
- lineárna algebra

# Reprezentácia qubitov

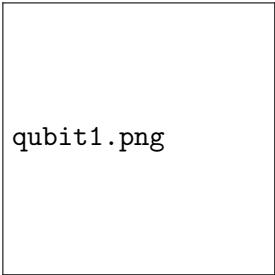
- vektory
- Blochova sféra
- $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ , kde  $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$  a  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$
- $|\alpha|^2$  je pravdepodobnosť, že qubit nameriame v stave  $|1\rangle$
- $|\beta|^2$  je pravdepodobnosť, že qubit nameriame v stave  $|0\rangle$

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$



qubit0.png

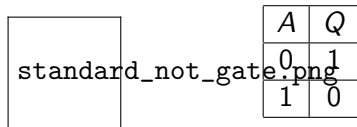


qubit1.png

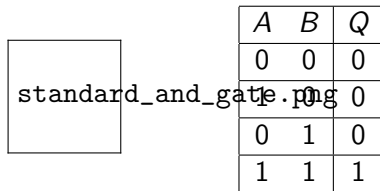
# Operácie na bitoch a qubitoch

## Logické hradlá

- NOT



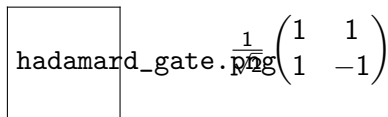
- AND



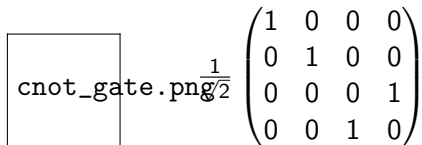
- ...

## Kvantové hradlá

- Hadamard



- Control NOT

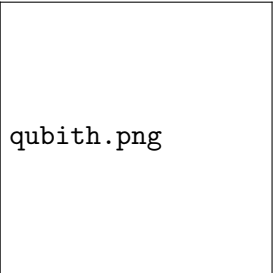


- ...
- všetky hradlá sú reverzibilné

# Superpozícia a kvantové previazanie

## Superpozícia

- stav môže byť lineárnou kombináciou stavov  $|0\rangle$  a  $|1\rangle$ 
  - $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$
  - $H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$



qubith.png

## Kvantové previazanie

- stav jedného qubitu je závislý na stave iného qubitu
- ľubovoľná vzdialenosť

# Variačný kvantový eigensolver (VQE)

- hybridný algoritmus
  - súčasne používame štandardný a kvantový počítač
- eigensolver
  - nájde vlastné číslo a vlastný vektor matice
- variačný princíp
  - umožňuje nájsť základný stav systému
- jeho hlavné využitie je najmä v chémii
  - nájdenie základného stavu molekuly

vqe.jpeg

# Ciele bakalárskej práce

## Príprava kvantového stavu

- budeme spúšťať VQE a hľadať najjednoduchšiu prípravu stavu vedúcu k výsledku
- pracujeme s knižnicou Qiskit (Quantum Information Science Kit)
  - open source Python knižnica vyvíjaná najmä spoločnosťou IBM
  - používame najmä simulátor, skúsime aj skutočný kvantový počítač



# Zdroje

- [https://qiskit.org/documentation/stable/0.34/\\_images/system\\_one.jpeg](https://qiskit.org/documentation/stable/0.34/_images/system_one.jpeg)
- [https://qiskit.org/documentation/stable/0.40/\\_images/quantum\\_interference.png](https://qiskit.org/documentation/stable/0.40/_images/quantum_interference.png)
- <https://images.ctfassets.net/hqm865gc1xfs/7ADhfqvgY0EesM5oSFHCiL/eb70f8716e2831015253e1eedced6320/2022-01-06-vqe.jpeg>