

Optimalizácia variačných kvantových eigensolverov

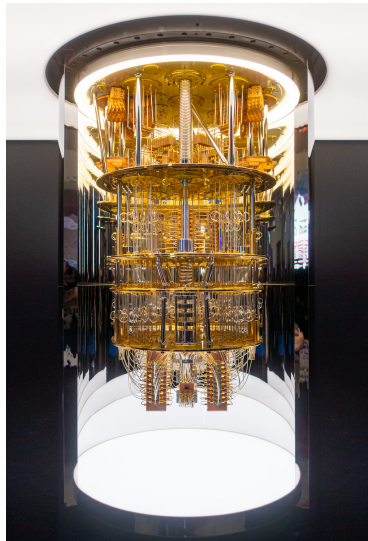
Michal Švec

doc. RNDr. Martin Plesch, PhD.

December 6, 2023

Kvantové počítače

- riadia sa zákonmi kvantovej mechaniky
 - opisuje správanie mikroskopických 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°C (0K)



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)

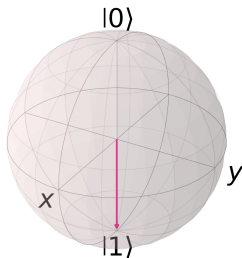
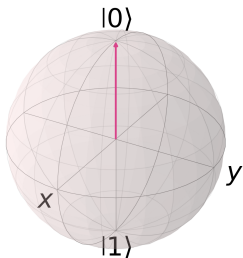
- najmenšia jednotka informácie v kvantovom počítači
- môže byť v stave $|0\rangle$, $|1\rangle$ alebo v akomkoľvek stave, ktorý je lineárnou kombináciou dvoch stavov s komplexnými koeficientami
- stav sa po meraní zmení na jeden z dvoch stavov $|0\rangle$ alebo $|1\rangle$
- nemôžeme kopírovať
- lineárna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

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

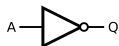
$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$



Operácie na bitoch a qubitoch

Logické hradlá

- NOT



A	Q
0	1
1	0

- AND

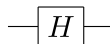


A	B	Q
0	0	0
1	0	0
0	1	0
1	1	1

- ...

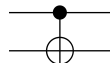
Kvantové hradlá

- Hadamard



$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

- Control NOT



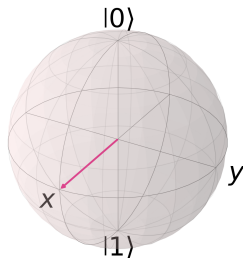
$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

- ...
- všetky hradlá sú reverzibilné

Superpozícia a kvantové previazanie

Superpozícia

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

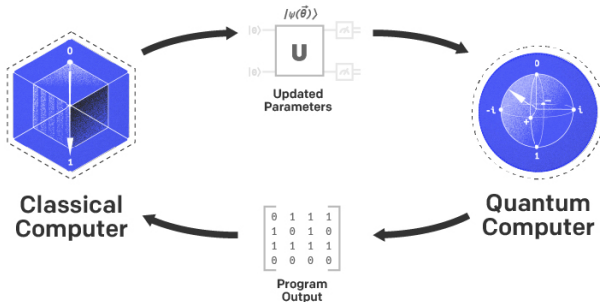


Kvantové previazanie

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

Variačný kvantový eigensolver (VQE)

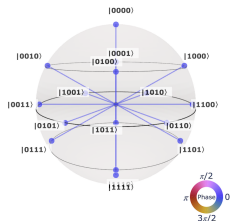
- hybridný algoritmus
 - súčasne používame štandardný a kvantový počítač
- eigensolver
 - nájde vlastné číslo a vlastný vektor matice
- variačný princíp
 - umožňuje nájsť základný stav systému
- jeho hlavné využitie je najmä v chémii
 - nájdenie základného stavu molekuly



Ciele bakalárskej práce

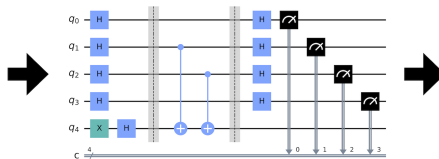
Príprava kvantového stavu

- 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

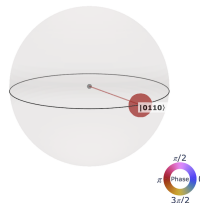


Superposition of all possibilities

Quantum circuit



Computation driven interference



Solution

Zdroje

- https://qiskit.org/documentation/stable/0.34/_images/system_one.jpeg
- https://qiskit.org/documentation/stable/0.40/_images/quantum_interference.png
- <https://images.ctfassets.net/hqm865gc1xfs/7ADhfqvgY0EesM5oSFHCiL/eb70f8716e2831015253e1eedced6320/2022-01-06-vqe.jpeg>