



Universiteit  
Leiden  
The Netherlands

## Optimization of quantum algorithms for near-term quantum computers

Bonet Monroig, X.

### Citation

Bonet Monroig, X. (2022, November 2). *Optimization of quantum algorithms for near-term quantum computers*. *Casimir PhD Series*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/3485163>

Version: Publisher's Version

License: [Licence agreement concerning inclusion of doctoral thesis in the Institutional Repository of the University of Leiden](#)

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/3485163>

**Note:** To cite this publication please use the final published version (if applicable).

# Samenvatting

Een quantumcomputer is een apparaat dat de wetten van de quantummechanica gebruikt om berekeningen uit te voeren. De interesse in quantumberekeningen komt voort uit de verwachting dat je daarmee sommige problemen veel sneller zou kunnen oplossen dan met klassieke computers. Men spreekt van quantumversnelling. In tegenstelling tot wat men wellicht zou denken, ligt het niet voor de hand dat quantumcomputers de klassieke computers ooit helemaal zullen vervangen. Hoogstwaarschijnlijk zullen ze geïntegreerd worden in grote supercomputers. Ze zullen worden gebruikt voor heel specifieke taken waarbij de quantumversnelling kan worden benut. In het afgelopen decennium is opmerkelijke vooruitgang geboekt bij het bouwen van prototypes van quantumcomputers, al zijn deze klein, kwetsbaar en foutgevoelig. Hoewel een grootschalige, ruisvrije quantumcomputer nog vele jaren van ons verwijderd is, verwachten we spoedig toegang te hebben tot quantumhardware die groot genoeg is om de beperkingen van de klassieke supercomputer te doorbreken. Dit proefschrift behandelt een aantal specten die van invloed zijn op kleine quantumcomputers, als zij gecombineerd worden met klassieke supercomputers.

Een van de meest uitdagende aspecten van bestaande quantumcomputers is het feit dat ze extreem foutgevoelig zijn. Als we ernaar streven nauwkeurige berekeningen van dergelijke apparaten te maken, is het belangrijk om dergelijke fouten zoveel mogelijk te verwijderen of te beperken. In hoofdstuk 2 ontwikkelen we de theorie van een strategie om fouten te beperken, gebruikmakend van het feit dat problemen in de natuurkunde en scheikunde eigenschappen hebben die onveranderd moeten blijven (bijv. aantal deeltjes, aantal spin-up/down-deeltjes, pariteit). Door een of meer van dergelijke eigenschappen te meten en te verifiëren dat ze ongewijzigd blijven ten opzichte van hun bekende waarde, kunnen we vaststellen wanneer er fouten zijn opgetreden. De uiteindelijke berekening wordt verbeterd door de berekeningen te verwijderen waarin de symmetrieën zijn gewijzigd. In hoofdstuk 3 zetten we de theorie van symmetrieverificatie aan het werk op een fysiek twee-qubit quantumapparaat voor de taak om de laagste energie van het waterstofmolecuul te berekenen. De voorgestelde foutbeperkingsstrategie laat een tienvoudige verbetering zien in de

nauwkeurigheid van de berekening.

Zelfs voor een middelgrote quantumcomputer met meer dan 50 qubits is de hoeveelheid geheugen die op een klassieke computer nodig zou zijn om de volledige beschrijving op te slaan astronomisch groot. Een quantumalgoritme moet daarom slechts een deel van de informatie gebruiken die de quantumtoestand beschrijft. In hoofdstuk 4 onderzoeken we wat en hoe we de relevante informatie van een quantumcomputer kunnen bepalen voor het berekenen van eigenschappen van fysische en chemische systemen. Onze belangrijkste bijdrage is een bewijs van het minimale aantal circuits dat hiervoor nodig is. Daarnaast bieden we een recept om circuits te construeren die exact overeenkomen met het analytisch berekende minimumaantal.

In vervolg werd de prestaties van optimalisatiealgoritmen die gebruik maken van een variatieprincipe analyseert. Een optimalisatie-algoritme is een stukje (klassieke) software die probeert de set parameters te vinden die een wiskundige functie minimaliseren (of maximaliseren). Computerwetenschappers hebben tientallen jaren van onderzoek besteed aan het ontwikkelen, bestuderen en benchmarken van optimalisatiemethoden voor een breed scala aan (klassieke) problemen. Een systematische studie van hun prestaties bij gebruik in combinatie met quantumhardware ontbreekt echter nog. Hoofdstuk 5 is een poging om deze leemte op te vullen door enkele van de meest gebruikte optimalisatiealgoritmen te vergelijken in een subset van modellen uit de natuur en scheikunde.

De afgelopen jaren hebben publieke en private quantumcomputerlaboratoria kleine quantumcomputers toegankelijk gemaakt via internetdiensten. Dankzij deze quantumcomputers “in de cloud” heeft het onderzoek naar quantumberekening een grote vlucht genomen, met honderden artikelen. In hoofdstuk 6 doen we een klein experiment met de Nederlandse quantumcomputer in de cloud, genaamd Quantum Inspire. We vinden dat de communicatie via het internet gepaard gaat met grote vertragingen, die op hun beurt de rekenprestaties beïnvloeden vanwege de korte levensduur van de qubits, zelfs voor een heel klein probleem. Daarom verwachten we dat het uitvoeren van grote berekeningen op cloudgebaseerde quantumcomputers moeilijk haalbaar zal zijn.

In het laatste hoofdstuk van het proefschrift onderzoeken we een toepassing van quantumcomputers in de quantumchemie, de berekening van de afgeleide van de energiefunctie. We beschrijven een methode om de afgeleide te berekenen in bestaande quantumhardware. De methode wordt vervolgens gebruikt om de geometrie van het model van het waterstofmolecuul en de polariseerbaarheid ervan te optimaliseren met een realistisch twee-qubit-apparaat. Ten slotte verifiëren we de resultaten van het experi-

ment met uitgebreide simulaties, waarbij we een heel goede overeenkomst vinden in zowel de simulatie van de chemie als de simulatie van het experiment.

