



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).

# Resum

Una unitat de processament quàntica o ordinador quàntic és un aparell de computació que utilitza les lleis de la mecànica quàntica per a executar càlculs. L'interés en la computació i algorísmia quàntica es deu al fet que els ordinadors quàntics poden resoldre alguns problemes molt més ràpidament que els ordinadors clàssics, fet que es coneix com acceleració quàntica. Contràriament al que es puga pensar, els ordinadors quàntics mai reemplaçaran els ordinadors clàssics. Probablement, les unitats de processament quàntiques seran integrades dins de grans supercomputadores, i seran utilitzades solament per a tasques específiques on l'acceleració quàntica puga ser explotada. L'última dècada s'ha caracteritzat per un progrés inaudit en la construcció de prototips d'ordinadors quàntics, encara que menuts (en nombre de qubits), fràgils i erronis. Tot i que encara que falten varies dècades per a veure l'aparició d'un ordinador quàntic a gran escala sense errors, creiem que en els pròxims anys podrem tenir a l'abast ordinadors quàntics amb un nombre de qubits suficientment gran, de tal forma que els superordinadors clàssics més potents no puguen simular-los. Aquesta tesi tracta gran part dels aspectes dels ordinadors quàntics amb errors quan es combinen amb ordinadors clàssics.

Un dels reptes més grans per a l'ús dels ordinadors quàntics existents és el fet que aquestes màquines són extremadament errònies. Si volem fer computacions utilitzant aquesta tecnologia és de vital importància eliminar, o al menys, reduir el nombre d'errors que ocorren durant l'execució dels algorismes. Al segon capítol desenvolupem la teoria per a mitigar errors utilitzant el fet que els problemes en física i química tenen propietats conegudes que han de ser constants, anomenades simetries (per exemple el nombre de partícules, la direcció del seu spin (up o down) o la seua paritat, entre d'altres). L'estratègia de reducció d'errors funciona mesurant una o més d'aquestes propietats, i verificant que el seu estat roman inalterat al final del càlcul. El resultat de la computació és millorat quan els resultats que senyalen que ha hagut un error són eliminats al final del procés. Al tercer capítol utilitzem la mitigació d'errors per verificació de simetries en un experiment amb un ordinador quàntic real de dos qubits, amb l'objectiu de calcular l'energia mínima de la molècula d'hidrogen. L'estratègia de mitigació d'errors per verificació de simetries fa que el

resultat final siga 10 voltes més precís que sense la redució d'errors.

Un ordinador quàntic d'uns  $\geq 50$  qubits pot produir un estat quàntic la descripció del qual requereix un nombre astronòmic d'espai en la memòria d'un ordinador clàssic. Per tant, extraure tota la informació d'un estat quàntic d'aquesta mida és impossible. En un algorisme quàntic és necessari extraure informació de l'estat quàntic, però aquesta informació sols pot ser parcial. Al quart capítol explorem com i quina és la informació rellevant de l'estat quàntic per a calcular propietats de sistemes físics i químics. La principal contribució d'aquest capítol és una demostració analítica del mínim nombre de circuits de mesura necessaris per a extraure les propietats de sistemes físics i químics més enllà de les energies, utilitzant les propietats de les matrius de densitat reduïdes. A més a més, hi descrivim un mètode pel qual arribem al mínim nombre de circuits per al cas de les matrius de densitat reduïdes d'ordre 2.

La tesi continua amb una anàlisi del rendiment d'alguns algorismes d'optimització en el context d'algorismes quàntics variacionals. Un algorisme d'optimització és un software clàssic que té com a finalitat trobar els paràmetres que mínimitzen (o maximitzen) una funció matemàtica de forma numèrica. Els enginyers informàtics porten dècades desenvolupant, estudiant i caracteritzant el rendiment de mètodes d'optimització numèrica en una gran varietat de problemes clàssics. Tanmateix, encara no existeix un estudi sistemàtic del rediment dels optimitzadors numèrics en algorismes quàntics variacionals. El cinquè capítol és un intent d'omplir aquest buit, on hi comparem alguns dels optimitzadors més populars en un conjunt de problemes modèlics en física i química.

En els últims anys hem vist una expansió dels servicis de computació quàntica a través de la xarxa, gràcies als laboratoris públics i privats que han ficat les seues unitats de processament quàntiques al servici de tot-hom. Això ha produït una democratització de la recerca en computació quàntica, reflectida amb la publicació de centenars d'articles cada any d'investigadors de tots els llocs del món. Al sisè capítol utilitzem el servici públic de computació quàntica dels Països Baixos, Quantum Inspire, per a fer un xicotet experiment. Els nostres resultats demostren que la interacció entre un ordinador quàntic en el núvol i un ordinador clàssic local a través de la xarxa té un sobrecost de comunicació que fa que els resultats siguen molt dolents, ja que la vida de l'ordinador és molt curta. Per tant, anticipem que executar grans càlculs en un ordinador quàntic al núvol serà problemàtic.

En l'últim capítol de la tesi explorem aplicacions dels ordinadors quàntics en química quàntica, en particular, el càlcul de derivades de l'energia. Ací describim un mètode per a calcular aquestes derivades en un ordinador

quàntic que pot existir en un futur no molt llunyà. A més, utilitzem aquest mètode per a calcular la geometria i la polaritzabilitat del model de la molècula d'hidrogen en un ordinador quàntic real de dos qubits. Finalment, fem ús de simulacions detallades per a verificar els resultats obtinguts a l'experiment, trobant una gran concordança tant amb la química del sistema, com entre les simulacions i l'experiment.

