



Universiteit  
Leiden

The Netherlands

## The power of one qubit in quantum simulation algorithms

Polla, S.

### Citation

Polla, S. (2024, February 22). *The power of one qubit in quantum simulation algorithms*. *Casimir PhD Series*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/3719849>

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/1887/3719849>

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

---

## Samenvatting

---

Quantumcomputing is een opkomende technologie die het potentieel heeft om complexe quantumsystemen te simuleren die buiten het bereik van klassieke numerieke methoden vallen. Ondanks de recente formidabele vooruitgang op het gebied van quantumhardware, blijft het bouwen van een quantumcomputer die nuttige berekeningen kan uitvoeren een uitdagende taak. Bij gebrek aan een betrouwbare quantumcomputer is de studie van potentiële toepassingen afhankelijk van wiskundige methoden, ingenieuze benaderingen en heuristieken die zijn afgeleid van de toepassingsgebieden. Dit proefschrift richt zich op de ontwikkeling van quantumalgoritmen met toepassingen in de simulatie van complexe quantumsystemen.

Het inleidende hoofdstuk schetst de uitdagingen van quantumsimulatie, identificeert en formaliseert de belangrijkste simulatiedoelstellingen, en bespreekt succesvolle quantum- en klassieke simulatiealgoritmen. Met behulp van de simulatie van chemische systemen als prototypisch voorbeeld leidt het hoofdstuk de lezer vervolgens door het proces van de ontwikkeling van quantumsimulaties.

De daaropvolgende hoofdstukken introduceren en detailleren nieuwe algoritmen voor quantumsimulatie, allemaal verbonden door de rode draad van het introduceren van een enkele hulpqubit in het simulatiealgoritme. Deze qubit (een fundamentele eenheid van quantuminformatie) speelt een actieve rol in elk algoritme en dient als sleutelement in het constructieve ontwerp ervan. Het belang van het werken met een eenvoudig systeem, zoals een qubit, wordt door het hele proefschrift heen duidelijk en blijkt essentieel te zijn vanuit zowel fundamenteel als toepassingsgericht perspectief.

Hoofdstuk 2 onderzoekt het simuleren van koeling via een met één qubit gesimuleerde koelmachine. In de natuur koelen systemen af door interactie met grote koude omgevingen, waar ze warmte en entropie kunnen afvoeren. Hoewel het theoretisch mogelijk is om dergelijke baden te simuleren, brengt dit een aanzienlijke rekenlast met zich mee. We stellen voor om de omgeving te vervangen door een enkele hulpqubit, die periodiek wordt gereset naar zijn energiezuinige toestand, waardoor warmte en entropie aan het systeem kan worden onttrokken, analoog aan de werking van een koelkast. Ons onderzoek naar koelmachines met één qubit brengt ons ertoe een categorie algoritmen te introduceren die zijn ontworpen voor het voorbereiden van energiezuinige toestanden van gesimuleerde systemen, die we *quantum digital cooling* (quantumdigitale koeling) noemen. We beschrijven verschillende mogelijke benaderingen van deze algoritmen en karakteriseren deze met analytische en numerieke hulpmiddelen.

De volgende drie hoofdstukken hebben betrekking op *echo verification* (echoverificatie) — een nieuwe techniek voor het beperken van fouten die voor het eerst wordt geïntroduceerd in hoofdstuk 3. Quantumapparaten vormen een aanzienlijke uitdaging vanwege hun inherente ruis, die leidt tot de geleidelijke corruptie van opgeslagen en verwerkte gegevens en uiteindelijk tot rekenfouten. Quantumhardwareonderzoek heeft tot doel het ruisniveau te verminderen, met langetermijnvooruitzichten voor quantumfoutcorrectie om dit probleem op te lossen. Ondertussen moet elk effectief quantumalgoritme worden ontworpen met bestendigheid tegen ruis in overweging. Technieken voor het beperken van fouten spelen een cruciale rol bij het bieden van deze mogelijkheid.

De foutbeperkingstechniek die in hoofdstuk 3 is geïntroduceerd, schrijft voor dat een enkel bit aan informatie uit een toestand van het gesimuleerde systeem moet worden gemeten, terwijl de resterende quantuminformatie wordt gebruikt om fouten te detecteren en hun effect te verminderen. Deze aanpak wordt geïmplementeerd via een methode die doet denken aan de echo van Loschmidt, omdat de single-qubit-meting is ingeklemd tussen twee berekeningen die elkaar in de tijd weerspiegelen. Echoverificatie is gemakkelijk toepasbaar op een grote verscheidenheid aan quantumalgoritmen die zijn afgestemd op bestaande technologie. We onderzoeken de toepassing ervan op het schatten van verwachtingswaarden en het schatten van quantumfasen met één controlequbit, waarbij we numerieke benchmarks uitvoeren op simulaties van kleine quantumchemie- en magnetismemodellen. De toepassing van deze techniek resulteerde in de meest uitgebreide experimentele test van een variationeel quantumalgoritme voor de chemie.

In hoofdstuk 4 bestuderen we de theoretische grenzen van het meetmodel

opgelegd door echoverificatie, waarbij per toestandsvoorbereiding een enkel bit aan informatie wordt geëxtraheerd. Dit model sluit aan bij de algemene categorie van binaire metingen en vertegenwoordigt ja-nee-vragen die kunnen worden gesteld over een quantumtoestand, en heeft een theoretische betekenis die verder gaat dan het bereik van echoverificatie. We ontwikkelen een raamwerk om de metingen van verwachtingswaarden binnen dit model te optimaliseren en een substantiële prestatieverbetering aan te tonen vergeleken met een naïeve aanpak.

In Hoofdstuk 4 onderzoeken we het gebruik van echoverificatie in een duidelijk andere context: het beperken van algoritmische fouten in het adiabatische algoritme. Het adiabatische algoritme is een belangrijke techniek die wordt gebruikt om fundamentele toestanden van een gesimuleerd systeem voor te bereiden. Hoewel de adiabatische stellingen hun succes verzekeren binnen de limiet van de oneindige rekentijd, zijn praktische eindige-tijdberekeningen gevoelig voor systematische fouten. Deze fout is van een andere aard dan de stochastische hardwarefout die doorgaans wordt aangepakt door mitigatietechnieken. We introduceren een techniek die het mogelijk maakt om de systematische fout om te zetten in een stochastische fout, waardoor de toepassing van echoverificatie het effect ervan kan onderdrukken.

Ten slotte onderzoekt hoofdstuk 6 een mogelijke toepassing van bestaande quantumcomputers in de quantumchemie: de detectie van conische intersecties in een moleculair model. Een groot deel van de quantumchemie is gebaseerd op de Born-Oppenheimer-benadering, die de beschrijving van kernen en elektronen scheidt. Conische intersecties zijn belangrijke punten in de geometrie van een molecuul, waar de Born-Oppenheimer-benadering mislukt. Dit vergemakkelijkt processen zoals niet-stralingsrelaxatie, die van bijzonder belang zijn bij de studie van fotochemische reacties. Conische intersecties worden gekenmerkt door een eigenschap die Berry-fase wordt genoemd en die alleen de discrete waarden 0 of  $\pi$  kan aannemen. We ontwerpen een quantumalgoritme dat het mogelijk maakt om deze twee waarden te onderscheiden, weergegeven in een enkel stukje informatie. De inherente discretisatie van het resultaat zorgt ervoor dat het algoritme bestand is tegen een bepaalde hoeveelheid ruis. We leveren analytisch bewijs van deze robuustheid en we voeren numerieke tests uit op een moleculair model dat is ontworpen om bepaald gedrag te reproduceren van het biochemische systeem dat verantwoordelijk is voor lichtperceptie.