



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).

La computazione quantistica è una tecnologia emergente che ha il potenziale di permettere la simulazione di sistemi quantistici complessi, oltre la portata dei metodi numerici classici. Nonostante gli ultimi anni abbiano visto formidabili progressi nello sviluppo dell'hardware quantistico, costruire un computer quantistico capace di eseguire calcoli utili rimane una sfida onerosa. In assenza di un calcolatore quantistico affidabile, lo studio delle possibili applicazioni si basa su metodi matematici, astute approssimazioni e strategie euristiche derivanti dai vari campi di applicazione. Questa tesi si concentra sullo sviluppo di algoritmi quantistici applicati alla simulazione di sistemi quantistici complessi.

Il capitolo introduttivo delinea le sfide della simulazione quantistica, individua e formalizza gli obiettivi principali ed esamina gli algoritmi (classici e quantistici) di maggior successo. Utilizzando la simulazione di sistemi chimici come esempio prototipico, il capitolo guida il lettore attraverso il percorso che porta allo sviluppo di un'applicazione della simulazione quantistica.

I capitoli successivi presentano e approfondiscono nuovi algoritmi per la simulazione quantistica, tutti accomunati dalla caratteristica di introdurre un singolo qubit ausiliario nell'algoritmo di simulazione. Questo qubit (un'unità fondamentale di informazione quantistica) gioca un ruolo attivo in ciascun algoritmo, fungendo da elemento chiave nel processo di sviluppo del metodo. La rilevanza del lavorare con un sistema semplice, come un qubit, si manifesta nel corso dell'intera tesi, dimostrandosi essenziale sia dal punto di vista fondamentale che applicativo.

Il capitolo 2 esplora la simulazione del processo di raffreddamento attraverso un frigorifero emulato a singolo qubit. In natura, i sistemi fisici si raffreddano interagendo con un ambiente esteso e freddo, nel quale possono dissipare calore ed entropia. Anche se la simulazione di tali ambienti termodinamici è possibile a livello teorico, essa comporta un notevole onere computazionale. Proponiamo di sostituire l'ambiente con un singolo qubit ausiliario, che viene periodicamente azzerato al suo stato di minima energia, consentendo quindi la ripetuta estrazione di calore ed entropia dal sistema simulato, in maniera analoga ad un frigorifero. La nostra indagine sui frigoriferi a singolo qubit ci porta a introdurre una categoria di algoritmi quantistici progettati per preparare stati fondamentali di sistemi simulati, che chiamiamo *quantum digital cooling* (raffreddamento quantistico digitale). Descriviamo vari approcci per la realizzazione di questi algoritmi, caratterizzandoli con strumenti analitici e numerici.

I successivi tre capitoli sono collegati alla tecnica di mitigazione degli errori chiamata *echo verification* (verifica dell'eco), sviluppata ed introdotta nel capitolo 3. Una sfida significativa del calcolo quantistico è posta dal rumore intrinseco ai dispositivi quantistici, che porta al graduale degrado dei dati memorizzati e processati e, in definitiva, provoca errori di calcolo. La ricerca sull'hardware quantistico mira a ridurre i livelli di rumore, ed a lungo termine la correzione quantistica degli errori promette di risolvere questo problema. Nel frattempo, qualsiasi algoritmo quantistico efficace deve essere progettato tenendo in considerazione la resilienza al rumore. Le tecniche di mitigazione degli errori svolgono un ruolo cruciale nel fornire questa resilienza.

La tecnica di mitigazione degli errori introdotta nel capitolo 3 prescrive di misurare un singolo bit di informazione da uno stato del sistema simulato, utilizzando il resto dell'informazione quantistica per rilevare gli errori e contrastarne gli effetti. Quest'approccio è implementato attraverso un metodo che ricorda l'eco di Loschmidt, poiché la misurazione di un singolo qubit è interposta tra due computazioni speculari nel tempo. La verifica dell'eco è facilmente applicabile a una vasta gamma di algoritmi quantistici progettati per i dispositivi del prossimo futuro. Esploriamo la sua applicazione alla stima del valore atteso e alla stima quantistica della fase a singolo controllo, conducendo test numerici su simulazioni di piccoli modelli chimica quantistica e magnetismo. L'adozione di questa tecnica ha portato al test sperimentale di un algoritmo quantistico variazionale per la chimica di massima dimensione.

Nel capitolo 4, studiamo i limiti teorici del modello di misurazione imposto dalla verifica dell'eco, in cui viene estratto un singolo bit di informazione da ogni stato preparato. Questo modello corrisponde alla

categoria generale delle misurazioni con esito binario, che ha rilevanza teorica al di là dello specifico campo della mitigazione degli errori. Sviluppiamo una metodologia per ottimizzare la misurazione del valore atteso all'interno di questo modello e dimostriamo un miglioramento sostanziale delle prestazioni rispetto a un approccio elementare.

Nel capitolo 4, esploriamo l'utilizzo della verifica dell'eco in un contesto nettamente diverso: la mitigazione degli errori algoritmici nell'algoritmo adiabatico. L'algoritmo adiabatico è un'importante tecnica utilizzata per preparare stati fondamentali di un sistema simulato. Seppure i teoremi adiabatici ne garantiscono il successo nel limite di tempo di calcolo infinito, in pratica la sua approssimazione a tempo finito è suscettibile ad errori sistematici. Questo errore ha una natura diversa dall'errore stocastico causato dal rumore dei dispositivi quantistici, sul quale le tecniche di mitigazione si concentrano. Introduciamo una tecnica che consente di convertire l'errore sistematico in uno stocastico, consentendo l'applicazione della verifica dell'eco per ridurre i suoi effetti.

Infine, il capitolo 6 esplora una potenziale applicazione dei computer quantistici del prossimo futuro in chimica quantistica: la identificazione di intersezioni coniche in un modello molecolare. Gran parte della chimica quantistica si basa sull'approssimazione di Born-Oppenheimer, che separa la descrizione di nuclei ed elettroni. Le intersezioni coniche sono punti significativi nella geometria di una molecola, dove l'approssimazione di Born-Oppenheimer cessa di essere valida. Questo permette processi come il rilassamento non radiativo, e riveste particolare importanza nello studio delle reazioni fotochimiche. Le intersezioni coniche sono caratterizzate da una proprietà chiamata fase di Berry, che può assumere solo i valori discreti di  $0$  o  $\pi$ . Progettiamo un algoritmo quantistico che consente di distinguere questi due valori, una distinzione rappresentabile in un singolo bit di informazione. La natura discreta del risultato rende l'algoritmo resiliente a una certa quantità di rumore; forniamo una prova matematica di questa resilienza. Conduciamo test numerici su un modello molecolare giocattolo, progettato per riprodurre alcuni comportamenti del sistema biochimico responsabile della percezione della luce.