

Kvantové algoritmy pro kvantově chemické problémy založené na časovém vývoji

Libor Veis

Kvantové algoritmy, které jsou založené na "časovém vývoji", mají potenciál *polynomiálně škálujících přesných výpočtů*. Obecně ale vedou na dlouhé kvantové obvody (v počtu CNOT hradel) a k jejich netriviální realizaci bude potřebná kvantová oprava chyb (quantum error correction, QEC).

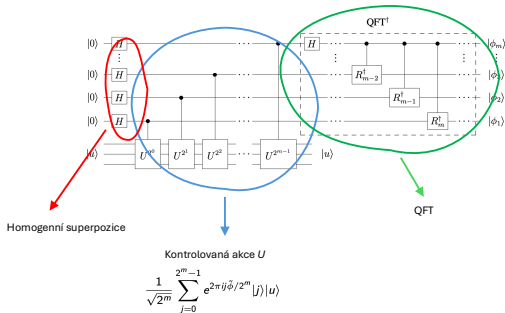
- 1 Kvantové algoritmy založené na phase estimation
- 2 Adiabatická příprava stavů
- 3 Vývoj v imaginárním čase

Kvantové algoritmy založené na phase estimation

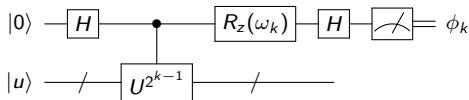
- Připomeňme si phase estimation:

$$\hat{U}|u\rangle = e^{2\pi i\phi}|u\rangle, \quad \phi \in (0, 1), \quad (1)$$

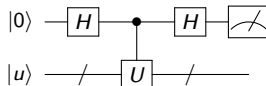
- ϕ je fáze odhadovaná algoritmem.



- a její iterativní verzi:



- Existuje koncepčně jednodušší algoritmus phase estimation (původní) podle A. Kitaeva - *Kitaev Phase Estimation*:



Úloha 1

Nejprve ukažte, že pokud bychom použili kvantový obvod Kitaev PE, bez druhého Hadamardova hradla, nejsme schopni měřením pomocného qubitu fázi změřit. Dále ukažte, že pravděpodobnost měření pomocného qubitu ve stavu $|0\rangle$ je $\cos^2 \pi\phi$ a stavu $|1\rangle$ $\sin^2 \pi\phi$.

- Smyslem (stejně jako u IPEA) je převést informaci o vlastním čísle (fázi) do relativní fáze pomocného qubitu.
- Tento přístup je očividně náročnější na měření - vyžaduje opakované měření a statistiku

Úloha 2

Vyzkoušejte si v prostředí <https://quantum.ibm.com/composer> Kitaev PEA s unitární maticí $U = Z$.

Časový vývoj pro přístupy založené na druhém kvantování

- Intermezzo - časově závislá Schrödingerova rovnice:

$$i \frac{d\psi}{dt} = H\psi \quad \Rightarrow \quad \frac{d\psi}{\psi} = -iHdt \quad (2)$$

$$\Rightarrow \quad \psi(t + \Delta t) = e^{-iH\Delta t}\psi(t) \quad (3)$$

- V případě diagonalizace Hamiltoniánu vezmeme

$$U = e^{-iH\tau}$$

$\tau \dots$ parametr podobný času zajišťující $\phi \in \langle 0, 1 \rangle$

$$|\psi_{\text{init}}\rangle \xrightarrow[\text{"časový vývoj"}]{e^{-i\tau H}} |\tilde{\psi}_{\text{init}}\rangle \xrightarrow[\tau \rightarrow E]{\text{Fourierova transformace}} \text{energie}$$

- Lehkou komplikací je, že jednotlivé členy elektronvého Hamiltoniánu *vzájemně nekomutují*

$$H = \sum_{pq} h_{pq} a_p^\dagger a_q + \frac{1}{2} \sum_{pqrs} \langle pq|rs \rangle a_p^\dagger a_q^\dagger a_s a_r, \quad (4)$$

proto $\exp \sum_j h_j \neq \prod_j \exp h_j$

- První krok: System to qubits mapping (např. Jordan-Wigner):

$$|\psi(t=0)\rangle \rightarrow |\psi_q\rangle \quad H(a_i^\dagger, a_j) \rightarrow H_q(X, Y, Z)$$

- Druhý krok: časový vývoj podle e^{-itH_q}

$$H_q = \sum_j^{\text{polynomial}} h_j, \quad \text{ale} \quad [h_j, h_k] \neq 0$$

$$e^{-itH_q} = e^{-it \sum_j h_j} = \left(\prod_j e^{-ih_j t/N} \right)^N + \mathcal{O}(t^2/N) \quad \text{Trotterova aproximace}$$

- Měření požadovaných vlastností (energie, spinové korelační funkce, apod.)
- Trotterizace není jediným přístupem pro aproximaci časového vývoje, existují i sofistikovanější algoritmy.
- Celková složitost škáluje nízkým polynomem v M (závisí na mnoha aspektech a stále se zlepšuje).
- Přístupy založené na PEA vyžadují dlouhé kvantové obvody $\Rightarrow$ kvantová korekce chyb, není cílem blízké budoucnosti.

- Phase estimation (ale i alternativní přístupy) potřebuje počáteční odhad vlastního vektoru

$$|\psi_{\text{init}}\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$$

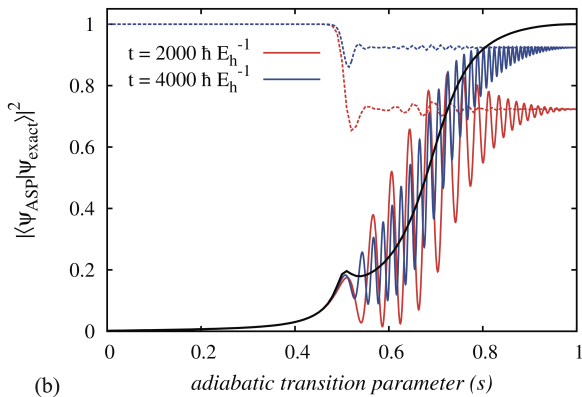
- Díky linearitě kvantové mechaniky je pravděpodobnost úspěchu úměrná $|c_i|^2$
- PEA lze použít jak pro základní, tak pro excitované stavy, ale vyžaduje rozumnou aproximaci cílového stavu (QMA-složitost obecného problému).
- ❶ Počáteční stavy poskytované konvenčními výpočetními metodami škálujícími polynomiálně: CI, CASSCF, DMRG atd.
- ❷ Adiabatická příprava stavu (adiabatic state preparation, ASP)
 - ▶ Začínáme s triviálním H_{init} (např. Hartree-Fock) a registrem v základním stavu, a pomalu přecházíme k H_{exact} :

$$H = (1 - t/T)H_{\text{init}} + (t/T)H_{\text{exact}} \quad t : 0 \longrightarrow T$$

- ▶ Účinnost ASP závisí na minimálním energetickém rozdílu mezi základním a prvním excitovaným stavem podél adiabatické cesty, g_{min}

$$g_{\text{min}} = \min_{0 \leq s \leq 1} [E_1(s) - E_0(s)], \quad s = t/T. \quad (5)$$

$$T \approx \mathcal{O}\left(\frac{M^4}{g_{\text{min}}^2}\right). \quad (6)$$



- To be done...