

Kapitola 1

Aktuálny stav

1.1 Qubit

V klasických počítačoch sú všetky údaje reprezentované nejakou postupnosťou bitov, ktoré môžu mať jeden zo stavov: 0 alebo 1. Analógiu v kvantových počítačoch pre klasický bit je qubit, 2-stavový kvantový systém, t.j. môže sa nachádzať v superpozícií dvoch základných kvantových stavov (v kontexte qubitu stavy 0 a 1).

Na popis qubitu sa najprv musíme oboznámiť s Hilbertovým priestorom. Presnú definíciu uvádzať nebudeme, dôležité pre nás bude, že to je vektorový priestor nad poľom komplexných čísel s operáciou skalárneho súčinu. Na zápis vektoru použijeme ket notáciu $|\varphi\rangle$, a na zápis skalárneho súčinu bra-ket notáciu $\langle\alpha|\beta\rangle$.

Matematicky qubit zodpovedá lúčom v Hilbertovom priestore. Lúč je trieda ekvivalencie na vektorovom priestore, kde dva vektory $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ sú v jednej triede ekvivalencie práve vtedy ak existuje $c \in \mathbf{C}$ také, že $|\alpha\rangle = c|\beta\rangle$.

Stav qubitu $|\psi\rangle$ zapíšeme v tvare

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

, kde pre $\alpha, \beta \in \mathbf{C}$ platí $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

1.1.1 Blochova sféra

Vlastnosti qubitu umožňujú jeho stav zapísať v tvare:

$$|\phi\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|0\rangle + e^{i\varphi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|1\rangle$$

Potom ľubovoľný qubit $|\phi\rangle$ s parametrami θ, φ vieme reprezentovať na povrchu Blochovej sféry podľa obrázku 1.1.

1.1.2 Viac qubitov

Pomocou n klasických bitov dokážeme vyjadriť 2^n rôznych hodnôt. Analogicky pri rastúcom počte qubitov exponenciálne rastie dimenzia vektorového priestoru opisujúceho systém týchto qubitov. Vo všeobecnosti na vyjadrenie kvantového stavu n qubitov potrebujeme 2^n komplexných čísel (upresniť).

Nech \mathbf{e}_i je vektor v n -rozmernom Hilbertovom priestore (teda s 2^n súradnicami) s jednotkou na i -tej pozícii a nulami na zvyšných (pozície číslujeme od nuly). Potom bázové vektory sú z množiny $\{\mathbf{e}_i | 1 \leq i \leq 2^n\}$. V ket notácii zapíšeme vektor \mathbf{e}_i ako $|b(i)\rangle$, kde $b(i)$ je binárny zápis čísla i . Stav systému n qubitov potom zapíšeme:

$$\sum_{i=0}^{2^n-1} \alpha_i |x_i\rangle$$

kde $a_i \in \mathbb{C}$ pre $0 \leq i \leq 2^n - 1$. Systém 2 alebo viacerých qubitov nazývame kvantový register.

1.1.3 Operácie na qubitoch

- Unitárne transformácie - zodpovedajú násobeniu stavového vektora unitárnou maticou. Matica U je unitárna, ak platí $UU^\dagger = I$, kde U^\dagger je matica ktorá vznikne transponovaním U a komplexným združením jej prvkov. Pre niektoré z týchto matíc bolo podľa toho čo robia zavedené ich pomenovanie

– Rotácia okolo jednej z osí x, y, z , označenie R_x, R_y, R_z o uhol ϕ

* Pre os y sú to všetky matice v tvare

$$\begin{pmatrix} \cos(\frac{\phi}{2}) & -\sin(\frac{\phi}{2}) \\ \sin(\frac{\phi}{2}) & \cos(\frac{\phi}{2}) \end{pmatrix}$$

* Pre os z matice

$$\begin{pmatrix} e^{-i\frac{\phi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix}$$

* Rotáciu okolo osi x je možné získať z operácií R_y, R_z

Rotácie vieme zobrazit' na Blochovej sfére otočením vektora okolo príslušnej osi.

- Kontrolovaná negácia (CNOT) invertuje (prvý) cieľový qubit práve vtedy, keď zvolený kontrolný qubit je $|1\rangle$, čo znamená že stav

$$\alpha |00\rangle + \beta |01\rangle + \gamma |10\rangle + \delta |11\rangle$$

transformuje na stav

$$\alpha |00\rangle + \beta |01\rangle + \delta |10\rangle + \gamma |11\rangle$$

. Matica tejto transformácie je

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Dôležitou vlastnosťou tejto transformácie je, že pomocou nej dokážeme vytvoriť previazanie medzi qubitmi.

Unitárne transformácie sú reverzibilné.

- Meranie - projekcia stavu qubitu do jedného zo stavov $|0\rangle, |1\rangle$, pre qubit

$$|\varphi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

je pravdepodobnosť že výsledok merania bude 0 (resp. 1) rovná $|\alpha|^2$ (resp. $|\beta|^2$). Meranie spôsobí kolaps stavu a nasledovné merania už budú opakovane dávať rovnaký výsledok s pravdepodobnosťou 1. Meranie nie je reverzibilné.

Maticie operácií pre viac qubitov

Vyššie uvedené matice pre rotácie vieme použiť iba na systém s jediným qubitom, maticu pre CNOT iba na systém dvoch qubitov. Pre rozšírenie týchto operácií na viac qubitov slúži tensorový súčin

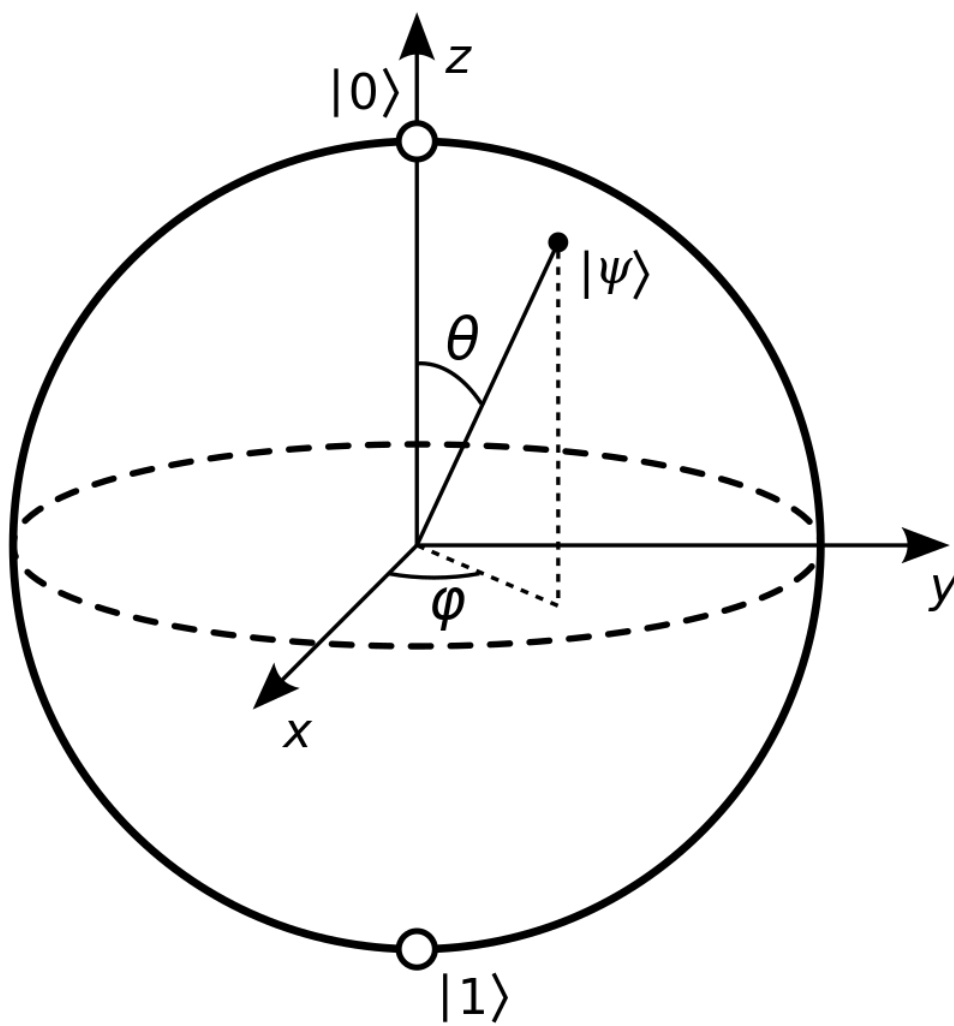
Pre štvorcové matice $A = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$ a $B = \begin{pmatrix} b_{11} & \dots & b_{1m} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ b_{m1} & \dots & b_{mm} \end{pmatrix}$ definujeme

tensorový súčin $A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11}B & \dots & a_{1n}B \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}B & \dots & a_{nn}B \end{pmatrix}$

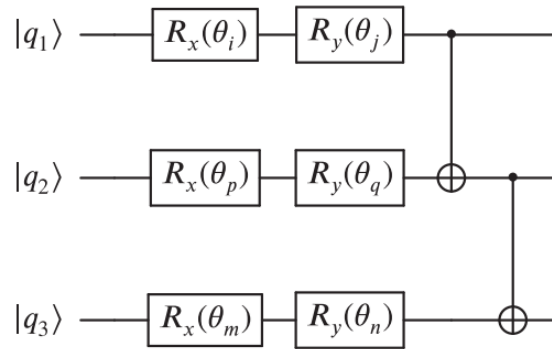
Rotácie a CNOT-y sú univerzálne

Okrem rotácií a CNOT-ov vieme vymyslieť nekonečne veľa ďalších operácií, ale každú z nich vieme rozložiť práve na vyššie uvedené operácie. Navyše, v článku Shendeho et.al. [3] sa uvádza

- ľubovoľný n -qubitový stav sa dá dosiahnuť s použitím najviac $2^{n+1} - 2n$ CNOTov
- ľubovoľný n -qubitový operátor sa dá skonštruovať s použitím najviac $\frac{23}{48}4^n - \frac{3}{2}2^n + \frac{4}{3}$ CNOTov



Obr. 1.1: Blochova sféra



Obr. 1.2: Kvantový obvod, ktorý na každom qubite vykoná rotáciu okolo osi x a potom okolo osi y . Po rotáciach aplikuje CNOT s kontrolným qubitom q_1 a cieľovým qubitom q_2 , po ňom je ďalší CNOT s kontrolným qubitom q_2 a cieľovým q_3

1.1.4 Previazanie

Ďalším rozdielom medzi bitom a qubitom je schopnosť qubitov byť v previazanom stave, kedy stav jedného qubitu závisí (do nejakej miery) od nejakého iného qubitu. Extrémnym prípadom previazania je 2-qubitový systém v Bellovom stave, v prípade ktorého hovoríme o maximálnom previazaní:

$$|\varphi\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}$$

Keďže nenulové koeficienty majú v tomto stave iba vektory $|00\rangle$ a $|11\rangle$, tak meranie ktoréhokoľvek z oboch qubitov spôsobí, že druhý qubit bude po meraní v rovnakom stave.

1.1.5 Pozorovateľná

Pozorovateľná je vlastnosť systému, ktorú môžeme merať. V kvantových systémoch je pozorovateľná samoadjugovaný operátor, čo je matica, pre ktorú platí $A = A^\dagger$.

1.2 Kvantové počítače

1.2.1 Kvantové obvody

Na úlohy, ktoré zadávame kvantovému počítaču sa budeme pozeráť ako na postupnosť kvantových brán reprezentujúcich niektorú z operácií rotácie a kontrolovanej negácie, ktorej budeme hovoriť kvantový obvod. Kvantové obvody sú analógiou k booleovským obvodom a analogicky môžeme takéto obvody aj kresliť (obr. 1.2).

1.2.2 Porovnanie s klasickým počítačom

Z hľadiska vypočítateľnosti je kvantový počítač ekvivalentný klasickému, nie je ale známa simulácia lepšia ako taká, kde v pamäti držíme vektor reprezentujúci stav systému, ktorý násobíme unitárnymi maticami. Problémom je ale množstvo pamäte potrebnej pre túto simuláciu. Pre systém n qubitov si musíme pamätať 2^n rozmerný vektor, ktorý násobíme maticami typu $2^n \cdot 2^n$.

Lepšia simulácia ako vyššie uvedená nie je známa, čo by mohlo naznačovať, že kvantový počítač dokáže niektoré problémy riešiť rýchlejšie ako klasický. Zatiaľ ale nebol nájdený dôkaz o neexistencii takej simulácie.

Myšlienka simulácie klasického počítača na kvantovom je qubity používať ako klasické bity a simulovať na nich booleovské obvody. K tomu je potrebné navrhnúť analogické unitárne operácie k operáciám AND, OR, NOT tak, aby boli reverzibilné.

1.2.3 NISQ

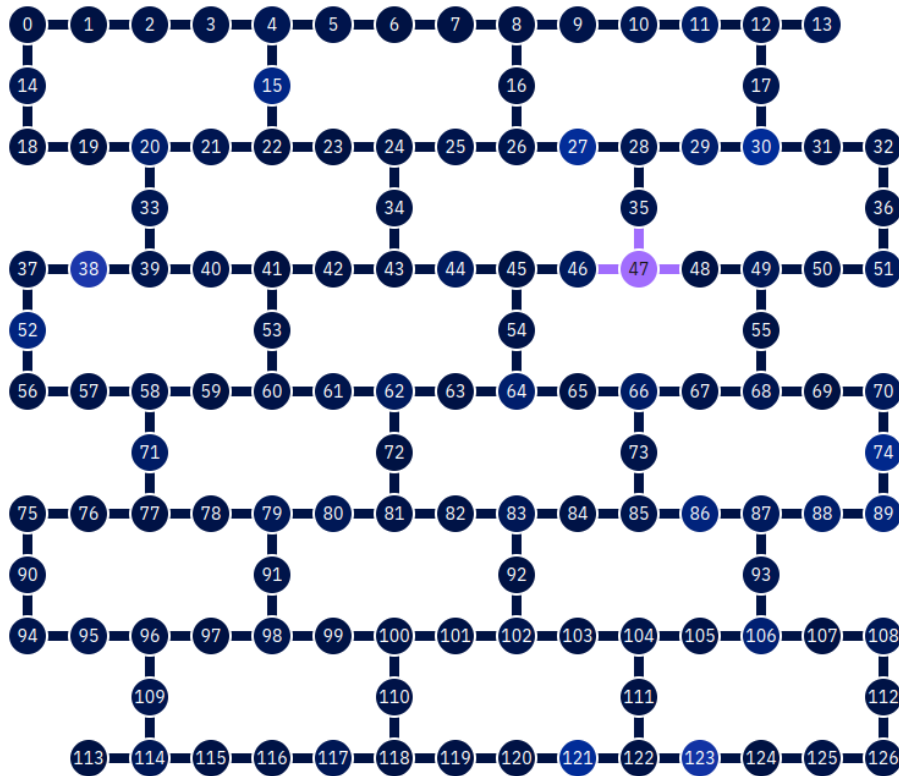
Súčasný stav kvantového počítania sa označuje ako NISQ - noisy intermediate scale quantum. Tieto počítače sú charakteristické citlivosťou na šum (noisy) a niekoľkými desiatkami až stovkami qubitov (intermediate scale). V dôsledku citlivosti na šum sú výpočty náchylné na chyby a preto je prakticky nemožné na NISQ počítačoch realizovať výpočty s veľkým počtom hradiel. Qubity v NISQ počítačoch majú tendenciu v čase strácať svoje kvantové vlastnosti v dôsledku interakcie s okolím, tento jav nazývame dekoherencia.

Napriek nedostatkom NISQ počítačov je možné ich využiť, ak budeme šetriť počet kvantových brán a výpočet nebude trvať príliš dlho. V práci sa budeme zaoberať optimalizačnými algoritmi, kde optimalizáciu riadi klasický počítač a na určenie hodnotovej funkcie použije kvantový počítač. Na kvantovú časť výpočtu sa môžeme pozerať ako na subrutinu, ktorá sa navonok nelíši od subrutiny vykonávanej na klasickom počítači. Algoritmy kombinujúce klasické a kvantové počítače budeme nazývať hybridné kvantové algoritmy. Algoritmy navrhnuté pre použitie na NISQ zariadeniach označujeme ako NISQ algoritmy.

Konektivita qubitov

Okrem vyššie spomenutých nedostatkov majú súčasné kvantové počítače aj obmedzené možnosti interakcie dvojíc qubitov. Konektivita hovorí, ktoré qubity môžu medzi sebou interagovať, teda na ktoré dvojice qubitov je možné použiť dvojqubitové operácie.

Konektivitu qubitov môžeme zobraziť ako graf, kde qubity s indexami i a j môžu interagovať práve vtedy, keď i a j sú susedmi v tomto grafe. Napríklad na obrázku 1.3 môže qubit 0 interagovať len s qubitmi 1 a 14.



Obr. 1.3: Graf konektivity qubitov

1.2.4 Prístup ku kvantovým počítačom

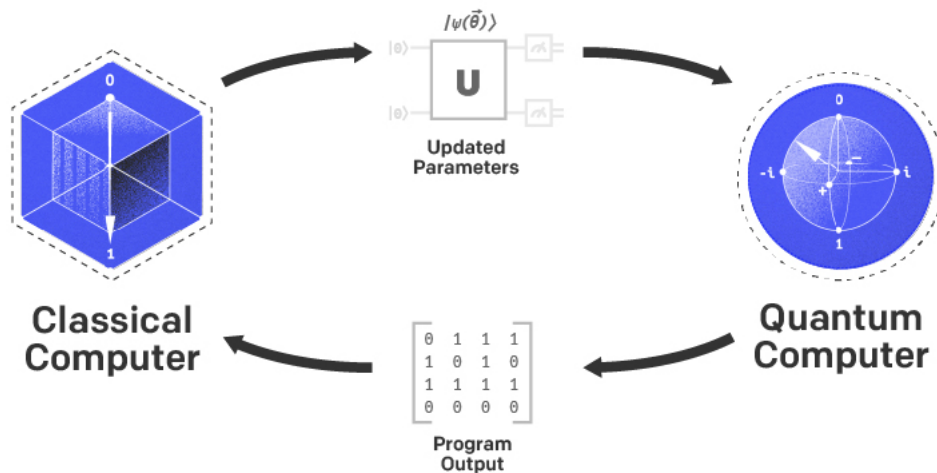
Pre prístup ku kvantovým počítačom budeme využívať cloudovú službu od IBM. Čas prístupu je ale obmedzený, preto väčšinou budeme používať simulátor.

Pre implementáciu programov s kvantovými obvodmi budeme využívať jazyk Python a súbor nástrojov qiskit.

1.3 Hybridné algoritmy

Vyššie sme spomenuli pojem hybridného kvantového algoritmu. Vo všeobecnosti ide o akékoľvek algoritmy kde jeden problém riešia spoločne riešia klasický a kvantový počítač.

V práci sa budeme zaoberať hybridnými algoritmi riešiacimi optimalizačné problémy, kde optimalizáciu riadi klasický počítač, ktorý na výpočet hodnotovej funkcie využíva kvantový počítač. Na základe odpovedí kvantového počítača potom klasický počítač určuje ďalší priebeh výpočtu.

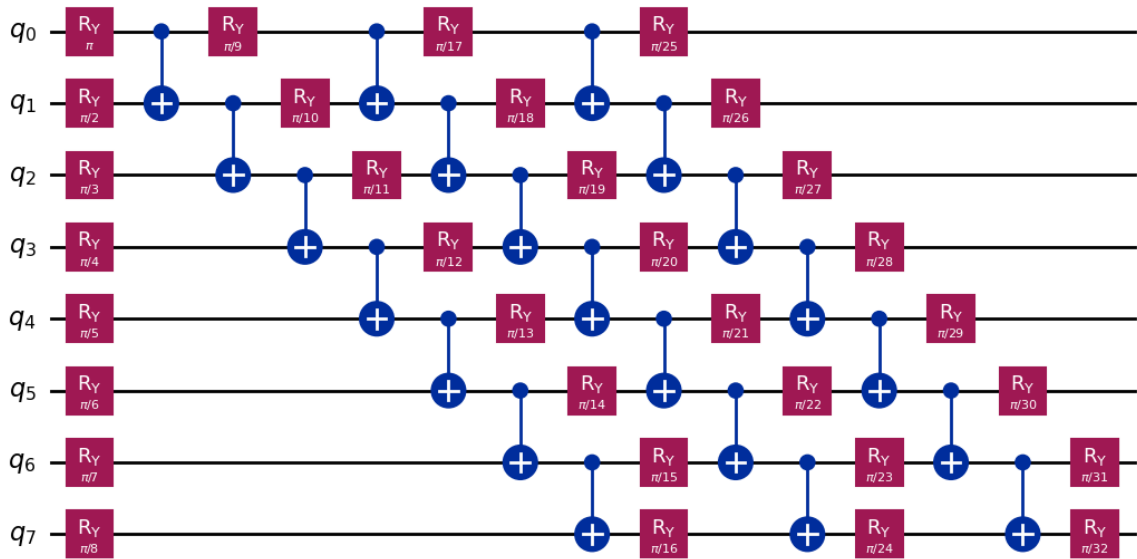


Obr. 1.4: Spolupráca klasického a kvantového počítača

1.3.1 Variačné algoritmy

V tejto časti predstavíme variačné algoritmy, budeme pri tom čerpať z prehľadových článkov Tillyho et.al. [4] a Cereza et.al [2]. Variačné algoritmy sú hybridné algoritmy, kde kvantový počítač počíta hodnotovú funkciu na základe parametrizovaného kvantového obvodu. Parametre tohto obvodu aktualizuje v priebehu výpočtu klasický počítač, spôsobom daným zvoleným optimalizačným algoritmom. Pri implementácii variačného algoritmu budeme potrebovať:

- Parametrizovaný obvod - kvantový obvod ktorý budeme opakovane spúšťať s rôznymi parametrami. Výber obvodu závisí od konkrétneho problému, požadujeme od neho malý počet kvantových brán kvôli akumulovaným chybám kvantových brán a zároveň aby bol čas výpočtu čo najkratší kvôli dekoherencii. V uvedených článkoch sa spomína viacero typov parametrizovaných obvodov. V práci sme zatiaľ pracovali s hardvérovo efektívnym obvodom s lineárnym previazaním (lineárne previazanie je efektívne pretože používa CNOT iba na qubity ktoré sú v grafe konektivity susedmi). Obvod obsahuje niekoľko vrstiev operácií rotácií a CNOT-ov (obrázok 1.5)
- Pozorovateľná - závisí od nej výsledok hodnotovej funkcie, určuje riešený problém.
- Klasický optimalizačný algoritmus - určuje stratégiu, podľa ktorej sa aktualizujú hodnoty parametrov. Podľa spôsobu prehľadávania ich môžeme rozdeliť do dvoch kategórií
 - gradientové - pri prehľadávaní využívajú gradient, vektor, v ktorého smere rastie hodnotová funkcia najviac. Kvôli výpočtu gradientu je ale tento spôsob prehľadávania aplikovateľný len na diferencovateľné funkcie.



Obr. 1.5: Lineárne previazanie. Nultá vrstva obsahuje iba rotácie, každá ďalšia vrstva obsahuje postupnosť CNOT-ov, kde najprv spojíme 0. qubit s 1., a postupne spájame i -ty a $i + 1$ -vý qubit, a potom rotácie. Počet CNOT-ov tu rastie s počtom vrstiev lineárne.

– negradientové

Výber optimalizačného algoritmu taktiež závisí od konkrétneho problému a z časti ide o experimentálny proces.

Z praktického hľadiska je predpokladom variačných algoritmov aj ich použitie na problémy, ktoré sú prirodzené pre riešenie kvantovým počítačom.

Problém barren plateau

Keďže hodnotovú funkciu určujeme meraním, ktoré má obmedzenú presnosť, môže sa stať že v každom smere bude funkcia rásť iba o nejaké hodnoty dostatočne malé na to aby sme ich nevedeli meraním odlišiť. V takomto prípade nie je na základe čoho rozhodnúť, ktorým smerom sa pri optimalizácii ďalej vybrať.

Mohlo by sa zdať, že toto bude problém iba pri gradientových stratégiách, ale článok Arrasmitha et.al.[1], že ani negradientové prehľadávanie nerieši tento problém.

1.3.2 Variačný kvantový eigensolver

Jedným z najlepšie využiteľných variačných algoritmov je variačný kvantový eigensolver, ktorý má za úlohu nájsť najnižšiu energiu kvantového systému. Pozorovateľná, ktorá určuje energiu kvantového systému sa nazýva hamiltonián.

Kvantovým počítačom budeme hľadať minimálnu vlastnú hodnotu hamiltoniánu, teda pre hamiltonián H hľadáme najmenšiu hodnotu λ takú, že pre nejaký vektor \mathbf{u} platí:

$$H\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u}$$

Hodnota λ je zároveň aj minimálnou energiou daného kvantového systému.

Variačný kvantový eigensolver má využitie v kvantovej chémii, napr. pri simulácií interakcií medzi elektrónmi. Kým pre kvantový počítač je takýto problém prirodzený a veľkosť kvantového obvodu je polynomiálna od veľkosti systému, pre klasický počítač sú známe iba metódy s exponenciálnou zložitosťou.

Literatúra

- [1] Andrew Arrasmith, Marco Cerezo, Piotr Czarnik, Lukasz Cincio, and Patrick J Coles. Effect of barren plateaus on gradient-free optimization. *Quantum*, 5:558, 2021.
- [2] Marco Cerezo, Andrew Arrasmith, Ryan Babbush, Simon C Benjamin, Suguru Endo, Keisuke Fujii, Jarrod R McClean, Kosuke Mitarai, Xiao Yuan, Lukasz Cincio, et al. Variational quantum algorithms. *Nature Reviews Physics*, 3(9):625–644, 2021.
- [3] Vivek V Shende, Stephen S Bullock, and Igor L Markov. Synthesis of quantum logic circuits. In *Proceedings of the 2005 Asia and South Pacific Design Automation Conference*, pages 272–275, 2005.
- [4] Jules Tilly, Hongxiang Chen, Shuxiang Cao, Dario Picozzi, Kanav Setia, Ying Li, Edward Grant, Leonard Wossnig, Ivan Rungger, George H Booth, et al. The variational quantum eigensolver: a review of methods and best practices. *Physics Reports*, 986:1–128, 2022.