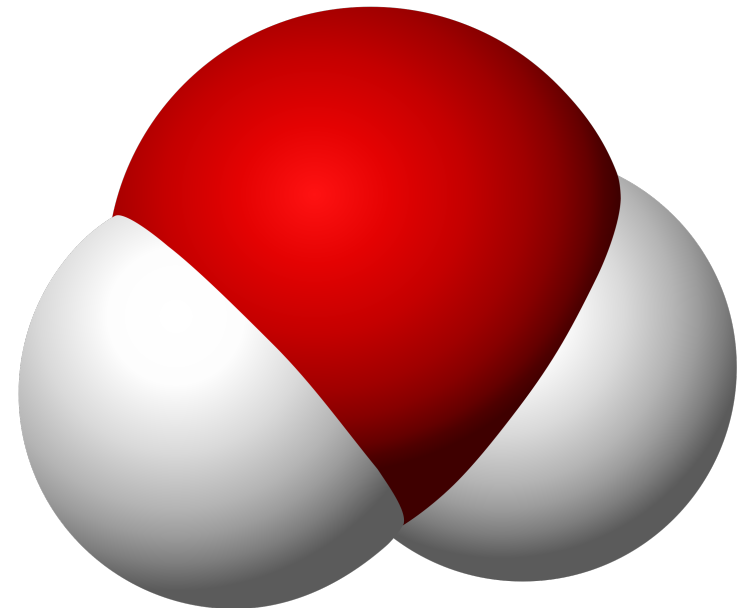
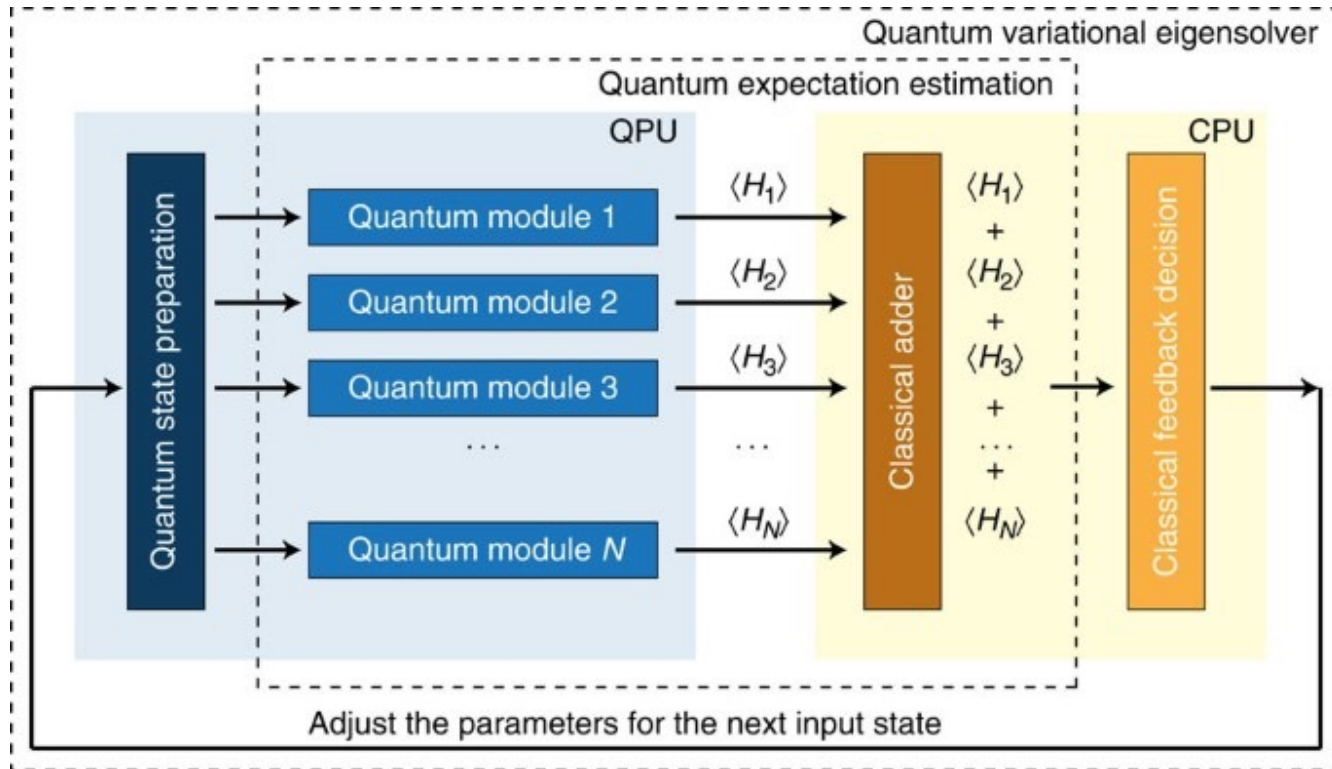


Kuantum Optimizasyon

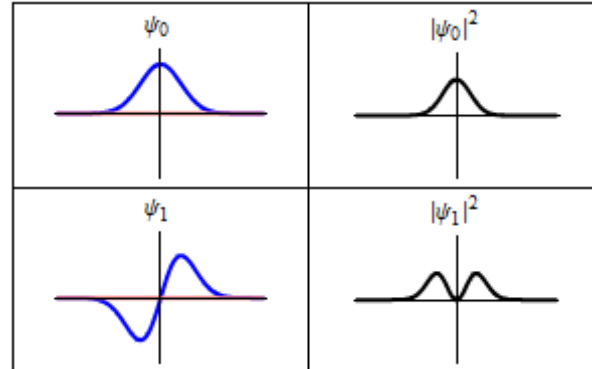


Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi (ZBSD)

ZBSD, Schrödinger Denkleminin değişkenlerin ayrılması yöntemiyle çözülmesi ile elde edilir.

$$\mathcal{H} |\Psi(x, t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)\rangle \xrightarrow{\Psi(x, t) = \psi(x)\zeta(t)} \mathcal{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

ZBSD, bir **özdeğer denklemidir**. Enerji öz durumlarına sistemin **Hamiltonyeninin** uygulanması, bu durumların enerji seviyelerini verir.



Bulunan enerji öz durumları **durağan durumlara** denk gelir. Durağan durumlarda sistemin herhangi bir durumda bulunma olasılığı sabittir. İzole moleküllerin enerji seviyeleri bu durumlara örnektir.

Denklemin Önemi ve Çözümündeki Zorluklar

Denklemin Önemi:

ZBSD'nin çözümleri, kuantum sistemlerin **enerji seviyelerini** bulmak için kullanılır. Bu denklemin çözümü moleküllerin, tepkimelerin ve spin sistemlerinin incelenmesinde büyük rol oynar.

Çözümdeki Zorluklar:

Bu özdeğer denklemini tam olarak çözebilmek için Hamiltonyen'in köşegenleştirilmesi gerekir. Ancak Hamiltonyen matrisinin boyutu sistemin yer aldığı Hilbert Uzayının boyutu ile üstel olarak artar.

Örnek:

$$|\Psi\rangle = \bigotimes_{n=1}^N |\psi\rangle_n, |\psi\rangle_n = \alpha_n |\uparrow\rangle + \beta_n |\downarrow\rangle \implies |\Psi\rangle \in \mathbb{C}^{2^N}$$

Bu sistemin Hamiltonyeninin boyutları $2^N \times 2^N$ olacaktır.

Bu sebepten büyük sistemler için bu denklemleri tam olarak çözmek çok zor ve verimsizdir.

Klasik Kompütasyonel Yöntemler

Ana Fikir: Sistemin dalga fonksiyonu, sistemin bazı **olası konfigürasyonlarının** lineer kombinasyonları şeklinde yazılabilir.

Hartree Fock:

Elektronlar arası **korelasyonu yok sayar**, her elektronun yalnız ortalama bir alandan etkilendiğini varsayar.

$$\psi(\mathbf{x}) = \begin{vmatrix} \chi_1(\mathbf{x}_1) & \dots & \chi_N(\mathbf{x}_1) \\ \chi_1(\mathbf{x}_2) & \dots & \chi_N(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots \\ \chi_1(\mathbf{x}_N) & \dots & \chi_N(\mathbf{x}_N) \end{vmatrix}$$

Full Configuration Inreaction:

Belirli bir düzeye kadar her orbital korelasyonunu hesaba katar. Teoride **tüm elektron konfigürasyonlarını** hesaba katar. Kullanması verimsizdir.

$$\psi = c_0\psi_0 + \sum_{s>0} c_s\psi_s$$

Coupled Cluster:

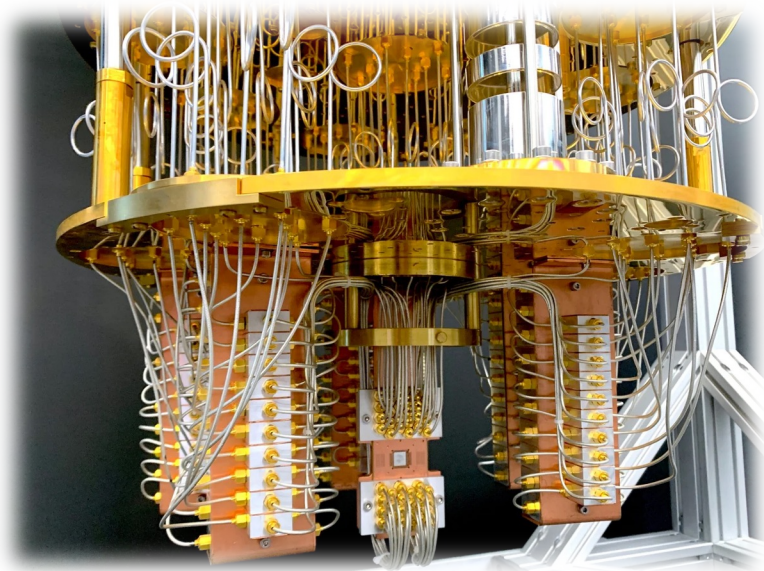
Farklı **elektron uyarımlarını** içeren bir cluster operatörü tanımlar. Bu operatörün başlangıç durumuna uygulanmasıyla farklı konfigürasyonların süperpozisyonları elde edilir.

$$T_1 = \sum_i \sum_a t_a^i \hat{a}^a \hat{a}_i,$$
$$T = T_1 + T_2 + T_3 + \dots,$$

Kuantum Bilgisayarlar Neden Önemlidir?

“Nature isn't classical, dammit, and if you want to make a simulation of nature, you'd better make it **quantum mechanical**, and by golly it's a wonderful problem, because it doesn't look so easy.”

-Richard Feynman



Kuantum Bilgisayar Nedir?

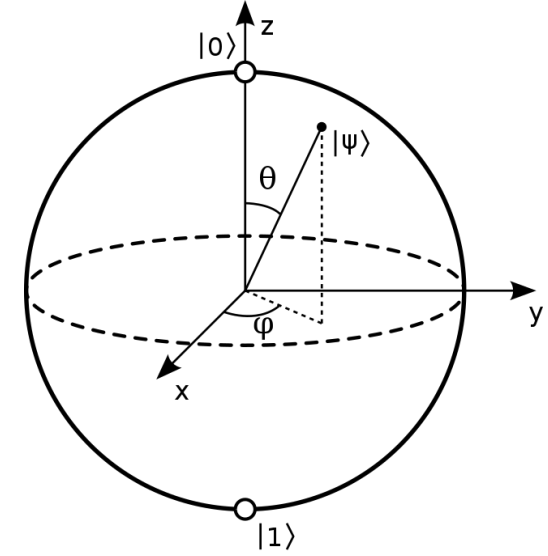
Klasik Bilgisayarlarda **Bit** Durumları:

$$S = a_1 a_2 \dots a_{n-1} a_n, a_i \in \{0, 1\}$$

Kuantum Bilgisayarlarda **Kübit** Durumları:

$$|\Psi\rangle = |\psi\rangle_n |\psi\rangle_{n-1} \dots |\psi\rangle_0,$$

Burada $|\psi\rangle_i = \alpha_i |0\rangle + \beta_i |1\rangle$ genelleştirilmiş tek kübit durumudur.



Operasyonlar:



$|x\rangle$



$|y\rangle$



Kuantum Faz Hesaplaması (KFH)

Amaç:

$U |\psi\rangle = e^{2\pi i\theta} |\psi\rangle$ denkleminde θ 'yı elde etmek

Ana Fikir:

$$|j\rangle |\psi\rangle \mapsto |j\rangle U^j |\psi\rangle : N \sum_{j=0}^{2^n-1} |j\rangle |\psi\rangle \mapsto N \sum_{j=0}^{2^n-1} |j\rangle U^j |\psi\rangle = N \sum_{j=0}^{2^n-1} |j\rangle e^{2\pi i j \theta} |\psi\rangle$$

Phase Kickback sayesinde n kübitte $N \sum_{j=0}^{2^n-1} |j\rangle e^{2\pi i j \theta}$ durumunu şifrelemiş oluruz.

Buradan Inverse Quantum Fourier Transform ile θ 'ya istenilen derecede yaklaşabiliriz.

KFH'nin Kimyada Kullanımı

Hamiltonyen Zaman Evrimi operatörü kullanılarak bir başlangıç durumundan (örn. HF) istenilen duruma gidilebilir.

$$U = e^{-iHt} \implies U |\psi\rangle = e^{iE_m t} |\psi\rangle$$

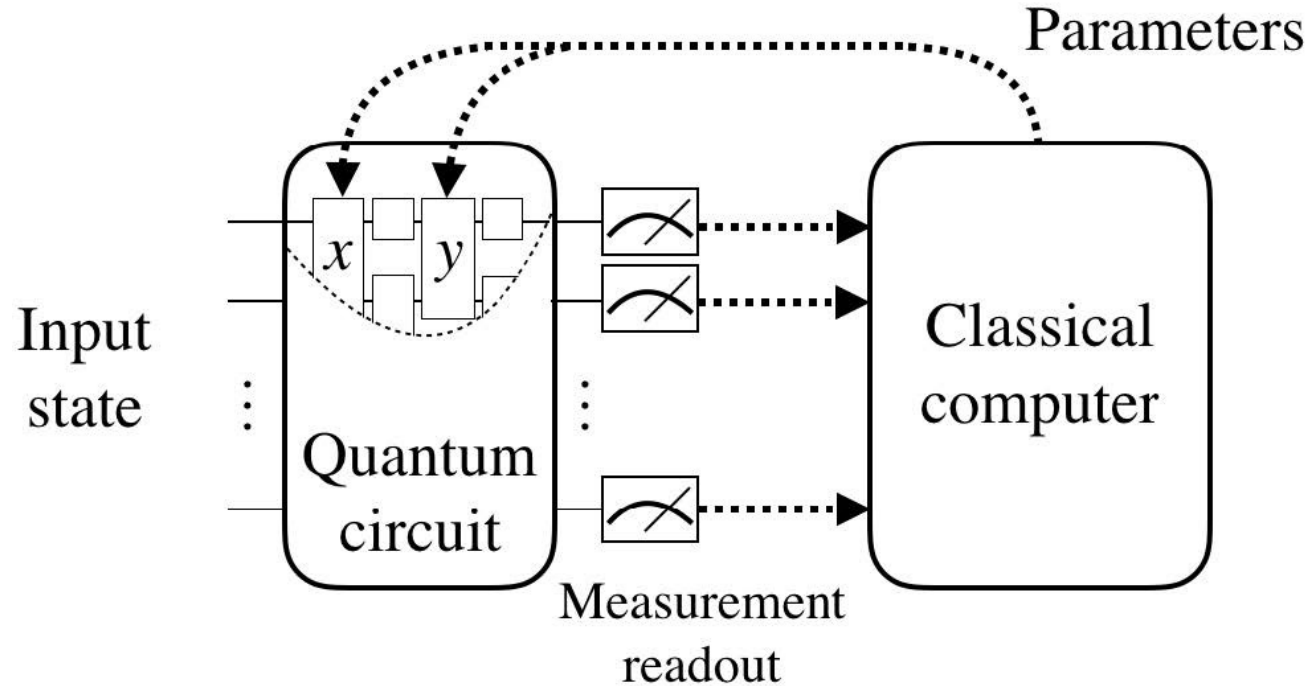
Ancak başlangıç durumu farklı durumların bir **lineer kombinasyonu** olacağından işin sonunda bir öz durum süperpozisyonu elde ederiz.

$$\text{KFH } |\psi\rangle_0 = \sum_m c_m |E_m\rangle |\psi_m\rangle$$

Bu sebepten başlangıç durumu seçimi çok önemlidir. $|c_0|^2$ yeterince büyük olmalıdır ki bir ölçüm sonrası sistem **taban durumuna çöksün**.

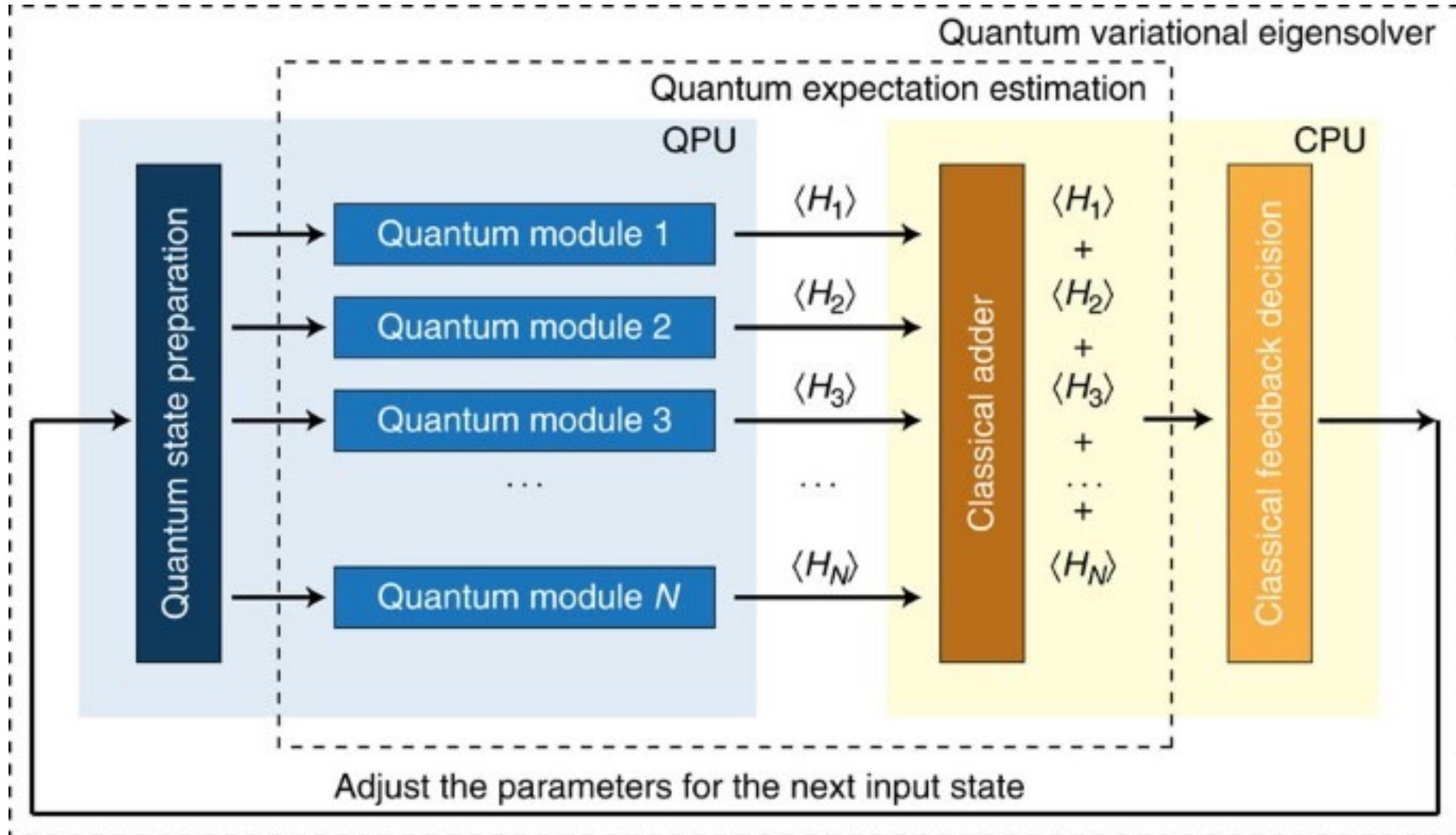
NISQ Dönemi

Bu algoritmalar ne kadar umut verici gözükürse gözüksün bunların uygulanabileceği güçte kuantum bilgisayarlar henüz **yapılmadı**.



Bu sebepten Gürültülü Orta-Ölçekli Kuantum Cihazlar (Noisy Intermediate-Scale Quantum Devices) ile çalışmaktayız. Bu cihazların kapasitesi daha düşük olduğundan **hibrit algoritmalar** kullanılmaktadır.

Varyasyonel Kuantum Özçözücü (VKÖ)



Varyasyonel İlke

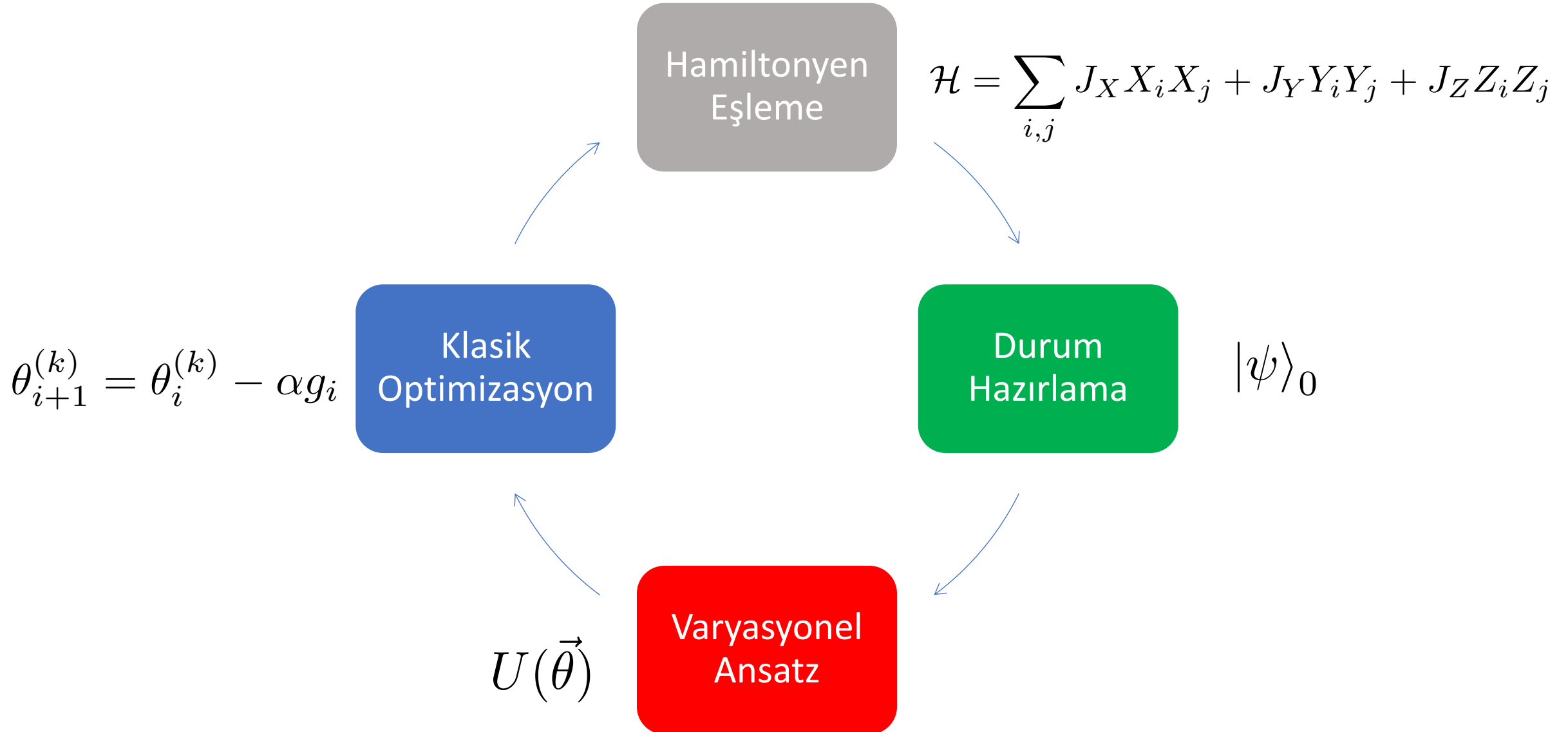
İlke:

$$\langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle \geq E_0$$

Kanıt:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle &= \left(\sum_n c_n^* \langle \psi_n | \right) \mathcal{H} \left(\sum_m c_m | \psi_m \rangle \right) = \sum_{n,m} c_n^* c_m \langle \psi_n | \mathcal{H} | \psi_m \rangle = \sum_{n,m} c_n^* c_m \langle \psi_n | E_m | \psi_m \rangle \\ &= \sum_{n,m} c_n^* c_m \delta_{n,m} \langle \psi_n | \psi_m \rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n = |c_0|^2 E_0 + \sum_{n>0} |c_n|^2 E_n \\ &= \left(1 - \sum_{n>0} |c_n|^2 \right) E_0 + \sum_{n>0} |c_n|^2 E_n = E_0 + \sum_{n>0} |c_n|^2 (E_n - E_0) \geq E_0 \end{aligned}$$

VKÖ'nün Adımları



Hamiltonyen Eşleme

Her tekrarda elimizdeki durumun Hamiltonyen ile **beklenen değerini** hesaplayabilmek için Hamiltonyeni cihazda hazırlamamız gerekir. Bunun için birkaç yöntem vardır:

- Jordan-Wigner Eşlemesi: Her **bir spini bir kübite** eşler.
- Parity (Eşlik) Eşlemesi: Her kübitte belirli bir indisten düşük alfa ve beta spin orbitallerin doluluğuna ilişkin **eşliği** kodlar. Belirli durumlarda iki kübit az kullanarak simülasyona izin verir.
- Bravyi-Kitaev Eşlemesi: Parity ve Jordan-Wigner eşlemelerinin **orta noktasıdır**. Orbital doluluğu ve belirli bir indisten düşük orbitallerin eşlik değerini bir arada kodlar.

Durum Hazırlama ve Varyasyonel Ansatz

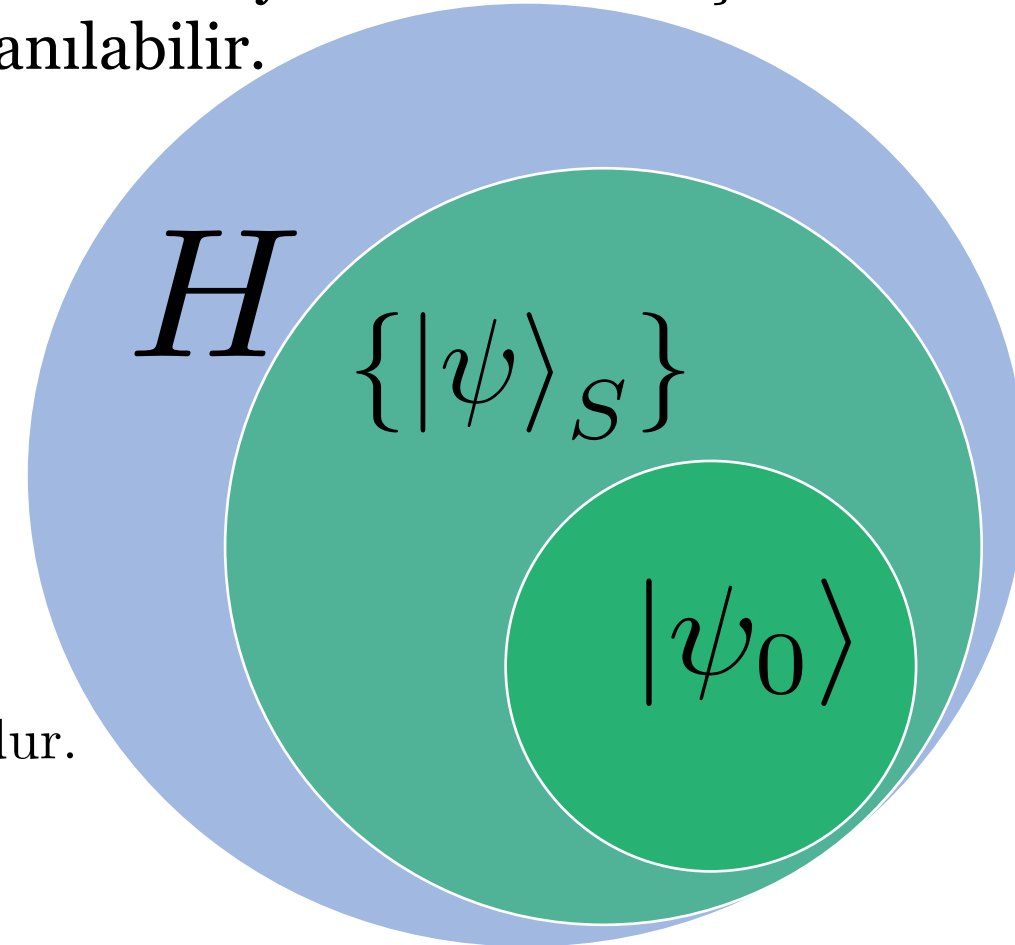
Elimizdeki başlangıç durumunu (genelde HF) güncellemek için ansatz adı verilen parametrelendirilmiş bir üniter operatör kullanılır. Bu ansatz, çözümün bir ögesi olduğu Hilbert uzayını aramamızı sağlar. Aranılan Hilbert uzayını daraltmak için problemin Hamiltonyen'inin simetrilerinden yararlanılabilir.

Simetri: $S, \mathcal{H}$ 'in simetrisi ise $[S, \mathcal{H}] = 0$

$|\psi\rangle$, $\mathcal{H}$ 'in bir öz durumu olsun. O zaman $\mathcal{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

$$[S, \mathcal{H}]|\psi\rangle = S\mathcal{H}|\psi\rangle - \mathcal{H}S|\psi\rangle = ES|\psi\rangle - \mathcal{H}S|\psi\rangle$$

$$[S, \mathcal{H}] = 0 \implies ES|\psi\rangle = \mathcal{H}S|\psi\rangle \implies |\psi\rangle, S\text{'in bir öz durumudur.}$$



Varyasyonel Ansatz

Ansatzlar iki başlık altında incelenebilir:

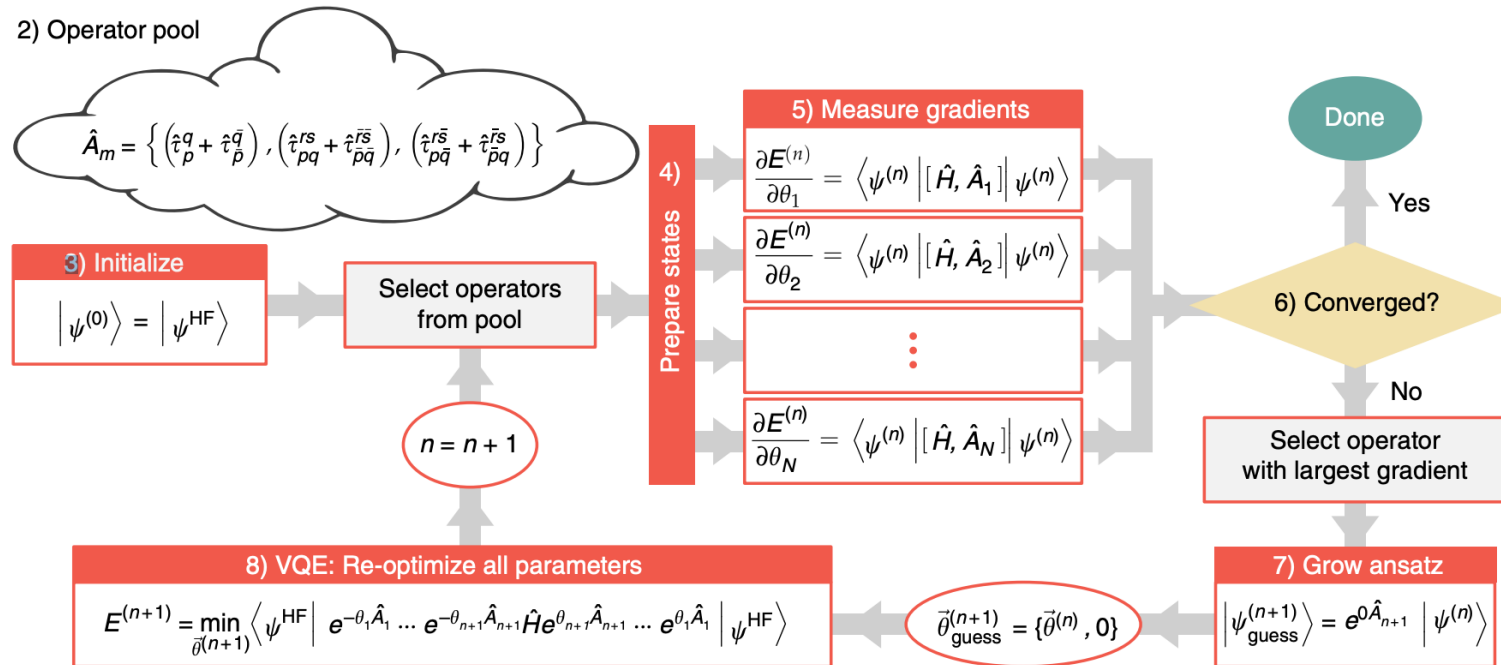
- **Donanımsal olarak Verimli Ansatz:**
 - Problemin kendi özelliklerindense eldeki donanımın elverdiği operasyonlara göre bir ansatz tasarlanır.
 - Örnek: **EfficientSU(2)**
- **Kimyadan Esinlenilmiş Ansatz:**
 - Problemin kendi özelliklerine göre bir ansatz tasarlanır. Simetrilerden ve benzer özelliklerden yararlanır.
 - Örnek: **Unitary Coupled Cluster (UCC)**

$$U = e^{T - T^\dagger}$$

Dinamik Ansatz

Ansatz, optimizasyon boyunca sabit kalmak zorunda değildir. Onun yerine ADAPT-VQE algoritmasında önerilen gibi dinamik bir ansatz da kullanılabilir.

$\hat{A}_m = \{T_1, T_2, T_3, \dots\}$ şeklinde bir operatör havuzundan belirli kurallara göre seçilen operatörler ansatzı oluşturur.



Klasik Optimizasyon

Ansatzın yeni parametreleri, klasik bilgisayarlarda optimizasyon ile belirlenir. Burada Hamiltonyen'in elimizdeki durumla beklenen değerinin gradyanı hesaplanır ve buna göre parametreler güncellenir.

Örnek:

$$f(\boldsymbol{\theta}) = \langle \psi(\boldsymbol{\theta}) | \mathcal{H} | \psi(\boldsymbol{\theta}) \rangle$$

$$\partial_{\theta_i} f(\boldsymbol{\theta}) = \frac{f(\boldsymbol{\theta} + \delta \hat{e}_i) - f(\boldsymbol{\theta} - \delta \hat{e}_i)}{2\delta}$$

$$\theta_i^{(n+1)} = \theta_i^n - \alpha \cdot \partial_{\theta_i} f(\boldsymbol{\theta})$$

Klasik Optimizasyon

Bazı Klasik Optimizasyon Yöntemleri:

Yöntem	Özet
SPSA	Stokastik Optimizasyon
COBYLA	Lineer Optimizasyon
SLSQP	Quadratik Optimizasyon
ADAM	Adaptif Optimizasyon
BFGS	İkinci Derece Optimizasyon
POWELL	Gradyansız Optimizasyon

Barren Plateau Problemi

Barren Plateau Problemi Nedir:

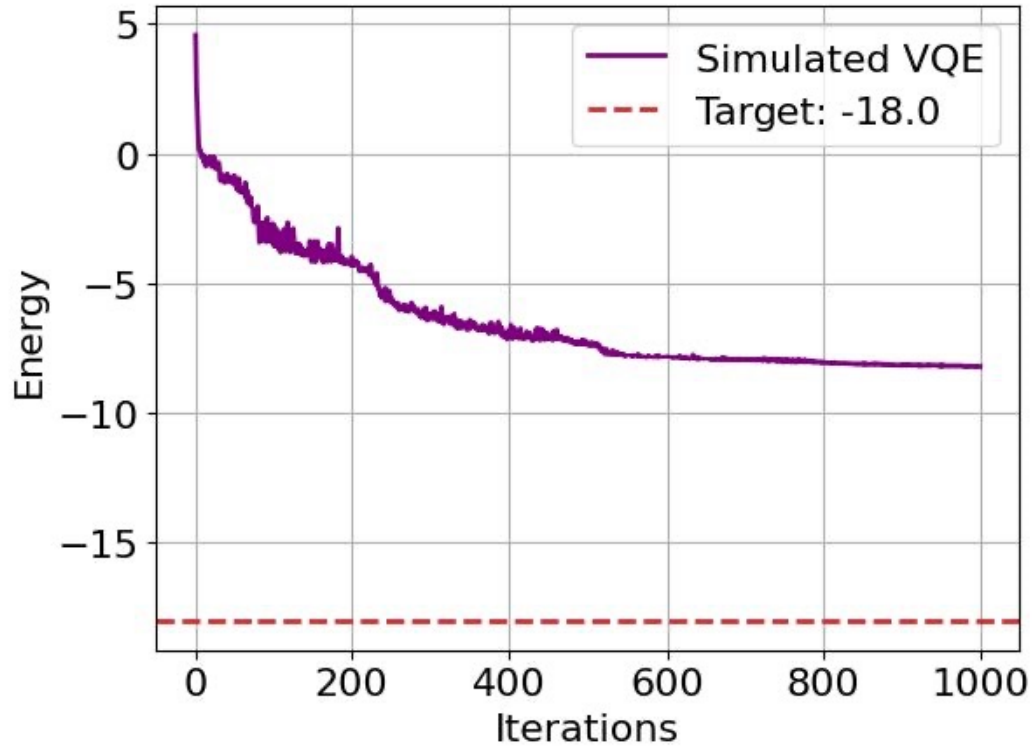
Varyasyonel algoritmalarda **gradyanın** lokal optimumlarda 0'a yakınsaması problemine denir.

Etkileyen Faktörler:

- Sistem boyutu ve rastgele başlatılma
- Expressibility
- Objektif Fonksiyonunun Yerelliği
- Gürültü
- Dolanıklık Dereceleri

Bir Örnek

Erken Barren Plateau



Barren Plateau Aşılmış

