

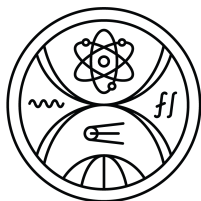
Comenius University Bratislava
Faculty of Mathematics, Physics and Informatics

Meno a priezvisko študenta: Ijaz Ahamed Mohammad
Študijný program: Theoretical Physics and Mathematical Physics (Single degree study, Ph.D. III. deg., full time form)
Študijný odbor: 13. Physics
Typ záverečnej práce: Dissertation thesis
Jazyk záverečnej práce: English
Sekundárny jazyk: Slovak

Title: Benchmarking of quantum computers

Abstrakt: The Variational Quantum Eigensolver (VQE) is a promising approach for solving quantum chemistry problems on today's noisy quantum devices. But in practice, it faces serious challenges. Quantum measurements are inherently noisy, number of shots (single runs of a quantum computer) are limited, and classical optimizers often fail to guide the search reliably in many-parametric spaces. This thesis addresses these challenges from two complementary directions. First, we develop a meta-optimization strategy designed to maximize the efficiency of limited quantum resources. Due to the inherent noise in quantum measurements, VQE runs must be repeated multiple times, yielding a collection of candidate solutions. A decision must then be made regarding which final solution to select. By modeling the success probability of a VQE run as a function of the shot budget, and introducing a reliability factor based on measurement uncertainty, we formulate a method that determines, for a fixed total budget of shots, how many independent optimization runs to perform and how much to allocate for final estimation. The proposed meta-optimization approach systematically balances exploration (from multiple runs) and precision (from final checking), ensuring that the probability of obtaining at least one solution within the desired accuracy range is maximized. Second, recognizing that the performance of VQE is highly dependent on the choice of classical optimizer, we developed an in-house optimizer: the Harmonic Oscillator-based Particle Swarm Optimizer (HOPSO). HOPSO draws inspiration from the well-known Particle Swarm Optimizer (PSO), while introducing key modifications suited to quantum optimization landscapes. First, incorporating the principles of energy conservation into the optimization process—modeled as the motion of particles (candidate solutions)—effectively controls the trade-off between exploitation and the accuracy of the final result. Second, it explicitly addresses the periodicity of cost functions, an inherent property of quantum state parametrization. We first benchmark HOPSO against other standard optimizers on classical test functions and subsequently demonstrate its superior performance in VQE tasks for molecular systems such as H_2 and LiH , particularly in high-dimensional and noisy environments. Together, these contributions enhance the reliability and efficiency of VQE, bringing it a step closer to practical deployment in near-term quantum computing applications.

Variačný kvantový eigensolver (VQE) je sľubný prístup na riešenie problémov kvantovej chémie na dnešných zašumených kvantových zariadeniach. V praxi však čelí vážnym výzvam. Kvantové merania sú prirodzene zašumené, počet použítí (jednotlivých spustení kvantového počítača) je obmedzený



a klasické optimalizátory často nedokážu spoľahlivo viesť vyhľadávanie v mnohoparametrických priestoroch. Predložené práca sa zaoberá týmito výzvami z dvoch vzájomne sa dopĺňajúcich smerov. Po prvé, vyvíjame metaoptimalizačnú stratégiu určenú na maximalizáciu efektívnosti využitia obmedzených kvantových zdrojov. Vzhľadom na prirodzený šum kvantových meraní sa musia behy VQE opakovať viackrát, čím sa získa súbor kandidátskych riešení. Potom sa musí rozhodnúť, ktoré konečné riešenie sa vyberie. Modelovaním pravdepodobnosti úspechu behu VQE ako funkcie rozpočtu na použitie a zavedením faktora spoľahlivosti založeného na neistote merania formulujeme metódu, ktorá pre daný celkový rozpočet použitia určuje, koľko nezávislých optimalizačných behov vykonať a koľko použití vyčleniť na konečný odhad. Navrhovaný prístup metaoptimalizácie systematicky vyvažuje hľadanie (z viacerých behov) a presnosť (z konečnej kontroly), čím zabezpečuje maximalizáciu pravdepodobnosti získania aspoň jedného riešenia v požadovanom rozsahu presnosti. Po druhé, keďže výkonnosť VQE do veľkej miery závisí od výberu klasického optimalizátora, vyvinuli sme vlastný optimalizátor: Harmonic Oscillator-based Particle Swarm Optimizer (HOPSO). HOPSO čerpá inšpiráciu zo známeho optimalizátora časticového roja (PSO), pričom zavádza kľúčové modifikácie vhodné pre kvantové optimalizačné krajiny. Po prvé, začlenenie princípov zachovania energie do optimalizačného procesu - modelovaného ako pohyb častíc (kandidátskych riešení) - účinne kontroluje kompromis medzi hľadaním do šírky a presnosťou konečného výsledku. Po druhé, HOPSO explicitne rieši periodicitu funkcie, ktorá je inherentnou vlastnosťou kvantovej parametrizácie stavu. HOPSO najprv porovnávame s inými štandardnými optimalizátormi na klasických testovacích funkciách a následne demonštrujeme jeho vynikajúci výkon v úlohách VQE pre molekulárne systémy, ako sú SH_2 a LiH , najmä vo vysokorozmerných a zašumených prostrediach. Tieto poznatky spoločne zvyšujú spoľahlivosť a efektívnosť VQE, čím sa približujú k praktickému nasadeniu v kvantových počítačoch v blízkej budúcnosti.

The Variational Quantum Eigensolver (VQE) is a promising approach for solving quantum chemistry problems on today's noisy quantum devices. But in practice, it faces serious challenges. Quantum measurements are inherently noisy, number of shots (single runs of a quantum computer) are limited, and classical optimizers often fail to guide the search reliably in many-parametric spaces. This thesis addresses these challenges from two complementary directions. First, we develop a meta-optimization strategy designed to maximize the efficiency of limited quantum resources. Due to the inherent noise in quantum measurements, VQE runs must be repeated multiple times, yielding a collection of candidate solutions. A decision must then be made regarding which final solution to select. By modeling the success probability of a VQE run as a function of the shot budget, and introducing a reliability factor based on measurement uncertainty, we formulate a method that determines, for a fixed total budget of shots, how many independent optimization runs to perform and how much to allocate for final estimation. The proposed meta-optimization approach systematically balances exploration (from multiple runs) and precision (from final checking), ensuring that the probability of obtaining at least one solution within the desired accuracy range



is maximized. Second, recognizing that the performance of VQE is highly dependent on the choice of classical optimizer, we developed an in-house optimizer: the Harmonic Oscillator-based Particle Swarm Optimizer (HOPSO). HOPSO draws inspiration from the well-known Particle Swarm Optimizer (PSO), while introducing key modifications suited to quantum optimization landscapes. First, incorporating the principles of energy conservation into the optimization process—modeled as the motion of particles (candidate solutions)—effectively controls the trade-off between exploitation and the accuracy of the final result. Second, it explicitly addresses the periodicity of cost functions, an inherent property of quantum state parametrization. We first benchmark HOPSO against other standard optimizers on classical test functions and subsequently demonstrate its superior performance in VQE tasks for molecular systems such as H_2 and LiH , particularly in high-dimensional and noisy environments. Together, these contributions enhance the reliability and efficiency of VQE, bringing it a step closer to practical deployment in near-term quantum computing applications.

Dátum odovzdania: 20.05.2025

.....
Študent