

FRAUNHOFER-INSTITUT FÜR ANGEWANDTE FESTKÖRPERPHYSIK IAF

KOMPETENZZENTRUMS QUANTENCOMPUTING BADEN-WÜRTTEMBERG

VERBUNDFORSCHUNGSPROJEKT

VERBESSERUNG DER EFFIZIENZ VON STABILITÄTSANALYSEN UND FEHLERKORREKTURPROTOKOLLEN FÜR KLASSISCHE, MITEINANDER GEKOPPELTE KRITISCHE INFRASTRUKTURNETZWERKE (-EFFEKTIF-)

Abschlussbericht

Februar 2023

Koordinator:

Dr. Mirjam Fehling-Kaschek (Mirjam.Fehling-Kaschek@emi.fraunhofer.de)

Stellv. Dr. Corinna Köpke (Corinna.Koepke@emi.fraunhofer.de)

Fraunhofer-Institut für Kurzezeitdynamik, Ernst-Mach-Institut (EMI)
Am Klingelberg 1,
79588 Efringen-Kirchen

Projektpartner:

Prof. Dr. Andreas Buchleitner (a.buchleitner@physik.uni-freiburg.de)

Quantum Optics and Statistics (QOS),
Physikalisches Institut,
Albert-Ludwigs-Universität Freiburg (UFR)

Inhalt

1	Zusammenfassung	4
2	Überblick der wissenschaftlichen Arbeiten	5
2.1	Von klassischen Netzwerken zu Quantennetzwerken (AP 1).....	5
2.2	Identifikation von Netzwerk-Defekten (AP 2).....	5
2.3	Vom Quantennetzwerk zum Quantenschaltkreis (AP 3).....	6
2.3.1	Zusammenfassung von Jahr 1	6
2.3.2	Quantenschaltkreise für offene Quantensysteme	6
2.3.2.1	Allgemeine Methode	6
2.3.2.2	Explizite Lösung für das Drei-Niveau-System	8
2.3.3	Dynamik von Drei-Niveau-Systemen	9
2.3.3.1	Klassische Simulationen	10
2.3.3.2	Berechnungen auf dem Quantencomputer.....	13
2.4	Quantenfehlerkorrektur (AP 4)	15
2.4.1	Quantifizierung der Quantenfehler.....	15
3	Ausblick.....	20
4	Anhang	21
4.1	Publikationen	21
4.2	Projektbezogene Patentanmeldungen	21
4.3	Vorträge	21
4.4	Im Themenfeld Quantencomputing geschulte Personen	21
4.5	Am Projekt beteiligte Industriepartner	21

1 Zusammenfassung

Ziel des Projekts war es zu untersuchen in wie weit Quantencomputer genutzt werden können um Graphen-theoretische Fragestellungen abzubilden und diese ggf. effektiver zu lösen als klassische Computer. Der Workflow, der im Projekt verfolgt wurde, umfasste die folgenden Arbeiten:

- Formulieren des physikalischen Graphen-Modells und entsprechender Eigenschaften.
- Entwicklung eines Quanten-Modells, das Defekte im Graphen-Modell berücksichtigt.
- Darstellung des Quanten-Modells in Qiskit.
- Berechnung des Quanten-Modells auf dem Quantencomputer in Ehningen.
- Untersuchung der Quantenfehler.

Die Ergebnisse des Projekts sollen genutzt werden um Hardware and Software zu identifizieren, die es ermöglichen Resilienz-Analysen vernetzter Versorgungsinfrastruktur so effizient wie möglich zu gestalten.

Die Arbeiten im Projekt EFFEKTIF wurden abgeschlossen und beide gesetzten Meilensteine, siehe Tabelle 1, grundsätzlich erreicht. Im Detail gab es allerdings kleinere Abweichungen von der geplanten Meilensteindefinition, die im Folgenden erläutert sind. Es wurde ein einfaches Netzwerk mit drei Knoten als Quantennetzwerk implementiert und die Berechnung der zeitlichen Entwicklung der Zustände auf dem Quantencomputer durchgeführt. Die Berechnungen und auch daran anknüpfende Betrachtung von Quantenfehlern (siehe Abschnitt 2.4) wurden zunächst für ein ungestörtes Netzwerk durchgeführt. Ein wichtiger Aspekt für die Resilienzbewertung von Netzwerken stellt die Störung des Systems durch den Ausfall von Knoten dar. Die Implementierung des Ausfalls wurde durch die Einführung eines defekten Zustandes im Modell gelöst. Die Berechnung der Defekt-Zustände auf dem Quantencomputer stellte sich als herausfordernd dar (siehe Abschnitt 2.3), jedoch konnten zum Projektende erste Ergebnisse für ein Drei-Niveau-System auf dem Quantencomputer berechnet werden. Eine Abweichung vom Projektplan ergab sich in Arbeitspaket 4, in dem ein Konzept für die Quantenfehlerkorrektur erarbeitet werden sollte. Die durchgeführten Arbeiten setzten auf einer niedrigeren Ebene an und beschränkten sich schließlich darauf, die Quantenfehler zu untersuchen.

Die Mitarbeiter des EFFEKTIF-Konsortiums haben sich zudem in der Theorie und Nutzung von Quantencomputern durch die Teilnahme an Schulungen weitergebildet.

Aufbauend auf den entstandenen Ergebnissen sollen die Arbeiten zur Resilienzbetrachtung von Netzwerken auf dem Quantencomputer im Folgeprojekt SEQUOIA End-to-End fortgesetzt werden. Das EFFEKTIF-Konsortium kann seine gesammelten Erfahrungen dort einbringen und zudem wird ein deutlicher Zugewinn an Expertise durch die Zusammenarbeit mit den neuen Konsortiumspartnern erwartet.

Tabelle 1: Meilensteine im Projekt.

Projekt-Monat	Meilenstein	Name	Status
8	MS1	Modell des Quantennetzwerks mit Signaturen der Netzwerkdefekte	Erreicht
18	MS2	Lauffähiges kleines Netzwerk auf dem IBM-Q-System	Erreicht

2 Überblick der wissenschaftlichen Arbeiten

Im Folgenden sind die geleisteten wissenschaftlichen Arbeiten im zweiten Berichtszeitraum (M13-M24) zusammengefasst. Gegliedert ist die Arbeit und auch das nachfolgende Kapitel in 4 Arbeitspakete:

- 2.1 AP1: Von klassischen Netzwerken zu Quantennetzwerken
- 2.2 AP2: Identifikation von Netzwerk-Defekten
- 2.3 AP3: Vom Quantennetzwerk zum Quantenschaltkreis
- 2.4 AP4: Quantenfehlerkorrektur

Dabei ist zu beachten, dass AP 1 und AP 2 bereits im ersten Jahr abgeschlossen wurden und der Fokus im zweiten Jahr auf AP3 und AP4 lag.

2.1 Von klassischen Netzwerken zu Quantennetzwerken (AP 1)

Die Arbeiten in AP1 wurden von M1 bis M4 durchgeführt. Der Fokus lag dabei in der Entwicklung eines Modells für ein Quantennetzwerk, welches in der Lage ist Defekte im Netzwerk abzubilden. Zunächst wurde das Netzwerk auf ein System mit drei Knoten vereinfacht, siehe Abbildung 1 (a). Die Verbindungen der Knoten des klassischen Netzwerkes wurden durch eine Dipol-Dipol Interaktion zwischen den Knoten des Quantennetzwerkes realisiert. Ein dritter Zustand soll schließlich den Übergang in einen defekten Zustand erlauben, siehe Abbildung 1 (b), welcher nicht mit den anderen Knoten interagiert.

Ausführlichere Ergebnisse und Zwischenschritte sind im Zwischenbericht dargestellt.

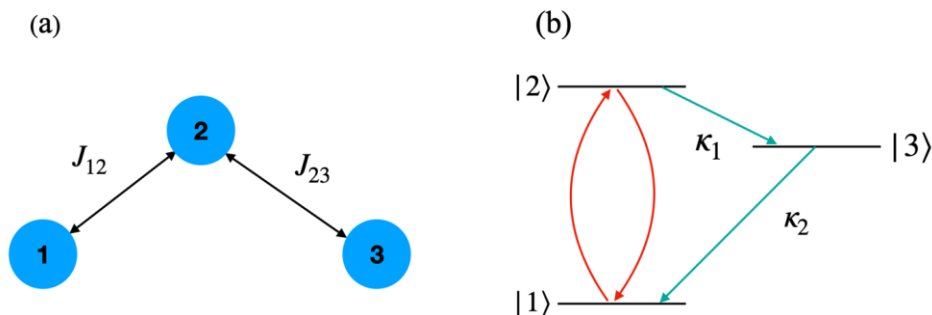


Abbildung 1: (a) Vereinfachtes Netzwerk mit drei Knoten und gewählten Verbindungen zwischen Knoten 1 und 2 und zwischen Knoten 2 und 3. (b) Drei-Niveau-System: Im Quantennetzwerk werden jedem Knoten ein Grundzustand $|1\rangle$ und ein angeregter Zustand $|2\rangle$ zugeordnet, die ein funktionierendes System darstellen. Der Übergang von $|2\rangle$ in den dritten Defekt-Zustand $|3\rangle$ entspricht der Deaktivierung des Knotens. Prinzipiell ist auch eine Reparatur des Knotens möglich, dargestellt durch den Übergang von $|3\rangle$ nach $|1\rangle$.

2.2 Identifikation von Netzwerk-Defekten (AP 2)

Die Arbeiten in AP2 wurden von M3 bis M8 durchgeführt. Basierend auf der Arbeit in AP1, wurde die Beschädigung der Knoten genauer untersucht. Hierzu wurde die zeitliche Entwicklung des Dichte-Operators des Netzwerks, gegeben durch

$$\dot{\rho} = (\mathcal{L}_{int} + \kappa_1 \mathcal{L}(\sigma_{32}^j))\rho, \quad (6)$$

betrachtet und numerische Lösungen berechnet. Ergebnisse der Berechnungen sind im Zwischenbericht zu finden.

Überblick der wissenschaftlichen
Arbeiten

2.3 Vom Quantennetzwerk zum Quantenschaltkreis (AP 3)

In diesem Kapitel werden die Methoden dargestellt um die Zeitentwicklung des entwickelten Quantensystems auf dem Quantencomputer berechnen zu können. Da es sich um ein offenes Quantensystem handelt sind hierfür einige Zwischenschritte nötig. Zunächst wird der Stand der Arbeiten nach Abschluss des ersten Jahres kurz zusammengefasst. Anschließend beschreiben wir eine Lösungsmethode um offene Quantensysteme mit Ein- und Zwei-Qubit Gattern darstellen zu können. Erst im Allgemeinen und dann explizit für unseren Fall. Am Ende stellen wir Ergebnisse für Drei-Niveau-Systeme vor, die klassisch simuliert wurden und auch welche, die auf dem Quantencomputer berechnet werden konnten.

2.3.1 Zusammenfassung von Jahr 1

Im ersten Projektjahr wurde untersucht ob das entwickelte Quantennetzwerk auf dem Quantencomputer simuliert werden kann. Dabei stellte sich heraus, dass die Beschreibung des Quantennetzwerks nicht den üblichen Formulierungen des Quantencomputings entspricht. Möglichkeiten für eine Übersetzung der Ansätze wurden aus der Literatur herausgearbeitet und geprüft. Mehr Informationen können im Zwischenbericht eingesehen werden.

2.3.2 Quantenschaltkreise für offene Quantensysteme

2.3.2.1 Allgemeine Methode

Offene Quantensysteme werden durch Dichteoperatoren beschrieben, wodurch das Konzept von reinen Zuständen, die durch „ket“-Vektoren dargestellt werden können, auf gemischte Zustände erweitert wird. Dieser Formalismus ist notwendig, wenn das beschriebene Quantensystem mit seiner Umgebung, deren Quantenzustand nicht bekannt ist, interagiert.

Wenn wir jedoch ein offenes Quantensystem auf einem Quantencomputer simulieren wollen, sind wir auf die Nutzung von unitären Ein- und Zwei-Qubit Gattern, in denen alle Quantenalgorithmen formuliert sind, angewiesen.¹

Um also die Erwartungswerte eines Quantensystems, welches nur durch Dichteoperatoren exakt beschrieben werden kann, mit einem Quantencomputer berechnen zu können, ist es notwendig Hilfsqubits zu nutzen. Auf die „ket“-Vektoren in diesem vergrößerten Hilbertraum kann ein unitärer Zeitentwicklungsoperator angewandt werden, welcher derart auf dem ursprünglichen System (ohne Hilfsqubit) wirkt, dass nach einer Projektion auf diesen Unterraum die Erwartungswerte denen des offenen Quantensystems entsprechen.

Die Erweiterung des Hilbertraums und die Wahl des zugehörigen unitären Zeitentwicklungsoperators sind nicht eindeutig. Wir haben uns für den Formalismus aus

¹ M.A. Nielsen and I.L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press, UK, 2000.

(Hu, 2020)² entschieden, der im Folgenden beschrieben wird, da er eine minimale Erweiterung des Hilbertraums verspricht und bei derzeit existierenden Quantencomputern die Anzahl der verwendeten Qubits entscheidend für die Genauigkeit der Ergebnisse ist.

Überblick der wissenschaftlichen Arbeiten

Eine Herausforderung bei diesem Ansatz ist, dass die nichtunitäre Zeitentwicklung des Dichteoperators

$$\varrho(t) = e^{\mathcal{L}t} \varrho(0),$$

in Kraus-Darstellung bekannt sein muss, wobei $\mathcal{L}_T$ der Liouville Operator unseres Netzwerks ist. Wir benötigen die obenstehende Gleichung in der Form:

$$\varrho(t) = \sum_{i=0}^{N-1} M_i(t) \varrho(0) M_i^\dagger(t),$$

wobei N die Hilbertraum Dimension ist und die $M_i(t)$, genannt Kraus-Operatoren, die Eigenschaft

$$\sum_{i=0}^{N-1} M_i^\dagger(t) M_i(t) = 1_N,$$

erfüllen, mit der N -dimensionalen Einheitsmatrix 1_N .

Wir erhalten die Kraus-Operatoren mit der folgenden Methode: Seien $\varrho(0)$ und $\varrho(t)$ die Dichtematrizen zu den Zeitpunkten $t = 0$ und $t > 0$, dann sind ihre spektralen Zerlegungen gegeben durch:

$$\varrho(0) = \sum_{i=1}^N p_i(0) |\psi_i(0)\rangle \langle \psi_i(0)|, \quad \varrho(t) = \sum_{i=1}^N p_i(t) |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t)|,$$

wobei $|\psi_i(0)\rangle \langle \psi_i(t)|$ und $p_i(0)(p_i(t))$ die orthonormalen Eigenvektoren und zugehörigen Eigenwerte des Dichteoperators $\varrho(0)(\varrho(t))$ sind.

Mit den N Eigenwerten von $\varrho(t)$ können wir N Matrizen der Dimension $N \times N$ wie folgt konstruieren:

$$M'_0(t) = \begin{pmatrix} \sqrt{p_1(t)} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sqrt{p_2(t)} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \sqrt{p_N(t)} \end{pmatrix},$$

$$M'_{N-1}(t) = \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 & \sqrt{p_1(t)} \\ \sqrt{p_2(t)} & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \sqrt{p_N(t)} & 0 \end{pmatrix}.$$

Mit diesen Matrizen und den Spektralzerlegungen erhält man die Kraus-Operatoren als

$$M_i(t) = V(t) M'_i(t) V(0)^\dagger, i = 0, \dots, N-1,$$

mit dem unitären Operator $V(t)$, der aus den Eigenvektoren von $\varrho(t)$ konstruiert wird:

$$V(t) = (\psi_1(t) \psi_2(t) \dots \psi_N(t))$$

$V(0)^\dagger$ ist der hermitesch konjugierte Operator, den man analog aus den Eigenvektoren des Anfangszustands $\varrho(0)$ erhält.

² Hu, Z., Xia, R., Kais, S., A quantum algorithm for evolving open quantum dynamics on quantum computing devices, Sci Rep 10, 3301, 2020

Aus jedem Kraus-Operator $M_i(t)$ lässt sich ein unitärer Operator, welcher eine Zeitentwicklung bewirkt, konstruieren. Diese Operatoren sind gegeben durch

$$U_i = \begin{pmatrix} M_i & \sqrt{1 - M_i M_i^\dagger} \\ \sqrt{1 - M_i^\dagger M_i} & -M_i^\dagger \end{pmatrix},$$

wobei die Zeitabhängigkeit hier der Übersichtlichkeit halber nicht explizit angegeben ist. Die Dimension des Raums auf dem U_i wirkt ist zweimal so groß wie die ursprüngliche Dimension, was bedeutet, dass nur ein einziges zusätzliches Qubit nötig ist um den Hilbertraum genügend zu erweitern.

Im letzten Schritt wird eine unitäre Matrix beliebiger Dimension zerlegt in Matrizen aus einem universellen Set von Matrizen, die Ein- und Zwei-Qubit Gatter darstellen. Dies kann mit Hilfe von wohlbekannten Methoden gemacht werden.

Es ist auch möglich die Operatoren U_k in Matrixform an die Klasse „Operator“ des qiskit-Pakets „quantum_info“ zu übergeben. Durch die in qiskit implementierte Funktion „transpile“ wird daraus ein Quantenschaltkreis, welcher die gewünschte Zeitentwicklung bewirkt.

Um am Ende den zeitlichen Verlauf der Erwartungswerte darstellen zu können ist es nötig die Operatoren U_k für viele verschiedene Zeitpunkte zu berechnen und jeweils zu transpilieren. Ist die Zeitabhängigkeit von M_k explizit gegeben, entsteht dadurch kein zusätzlicher Aufwand für den Anwender. Dennoch werden viele Schaltkreise generiert was einen Zeitaufwand sowohl bei der Transpilation als auch bei der Berechnung auf dem Quantencomputer bedeutet. Die Genauigkeit der Ergebnisse wird dadurch nicht direkt beeinflusst und indirekt sogar verbessert, da die Effekte des Rauschens durch eine Regressionskurve zwischen den Zeitpunkten unterdrückt werden können.

Das Hilfsqubit wird am Ende der Schaltkreise ebenfalls gemessen, aber es werden für das Ergebnis nur die Zustände betrachtet, bei denen das Hilfsqubit im Zustand 0 ist. Aus der Kraus-Darstellung ist ersichtlich, dass für ein Ergebnis für einen Zeitpunkt t die Resultate aller Quantenschaltkreise, die mit diesem Zeitpunkt als Parameter erstellt wurden, addiert werden müssen.

Die Beschreibung dieses Verfahrens bezieht sich auf Anfangszustände, die keine Mischungen sind, d.h. man könnte diese Zustände auch mit einem „ket“-Vektor darstellen. Die Methode selbst ist nicht auf diesen Spezialfall eingeschränkt und es wird in (Hu, 2020) beschrieben welche zusätzlichen Schritte im allgemeineren Fall nötig wären. Für unseren Anwendungsfall sind gemischte Startzustände vorerst nicht von Belang, da wir für eine vollständige Resilienzanalyse das System zunächst im funktionierenden Zustand benötigen. Die Interaktion mit der Umgebung (abgebildet durch das Hilfsqubit), welche eine Mischung von Zuständen verursacht, repräsentiert den Ausfall, bzw. die Reparatur, eines Knotens und diese Vorgänge sollen erst im Analyse-Zeitraum starten.

2.3.2.2 Explizite Lösung für das Drei-Niveau-System

Als nächstes wenden wir diesen allgemeinen Formalismus auf ein Drei-Niveau-System (siehe Abbildung 1 b) an. Zur Vereinfachung nehmen wir an, dass der Knoten zum Zeitpunkt $t = 0$ im angeregten Zustand $|2\rangle$ ist. Für $t > 0$ ist die Zeitentwicklung des entsprechenden Dichteoperators $\varrho(t)$ durch die Mastergleichung

$$\dot{\varrho} = \kappa_1 \mathcal{L}(\sigma_{32})\varrho + \kappa_2 \mathcal{L}(\sigma_{13})\varrho$$

gegeben, wobei κ_1 und κ_2 die Zerfallsraten der inkohärenten Übergänge sind und die Liouville Operatoren $\mathcal{L}(\sigma_{32})$ and $\mathcal{L}(\sigma_{13})$ durch

$$\mathcal{L}(x)\varrho = \frac{1}{2}([x, \varrho x^\dagger] + [x\varrho, x^\dagger])$$

definiert werden, wobei x für einen beliebigen Operator steht. Diese Mastergleichung enthält nur rein inkohärente Entwicklungen. Im allgemeineren Fall kann man auch kohärente Entwicklungen, wie die die von $\mathcal{L}_L$ erzeugt wird, in die Kraus-Operatoren einbauen.

Die Mastergleichung für das Drei-Niveau System kann analytisch gelöst werden. Die Dichtematrix $\varrho(t)$ hat in der Basis $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ die diagonale Form

$$\varrho(t) = \begin{pmatrix} \lambda_1(t) & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2(t) & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3(t) \end{pmatrix},$$

mit den Eigenwerten

$$\begin{aligned} \lambda_1(t) &= \frac{\kappa_1 - e^{-\kappa_2 t} \kappa_1 + (e^{-\kappa_1 t} - 1) \kappa_2}{\kappa_1 - \kappa_2}, \\ \lambda_2(t) &= e^{-\kappa_1 t}, \\ \lambda_3(t) &= \frac{(e^{-\kappa_2 t} - e^{-\kappa_1 t}) \kappa_1}{\kappa_1 - \kappa_2}. \end{aligned}$$

Mit Hilfe des oben beschriebenen Algorithmus können wir nun die explizite Form der Kraus-Operatoren erhalten. Da der Anfangszustand dem angeregten Zustand $|2\rangle$ entspricht, ergeben sich folgende Kraus-Operatoren:

$$\begin{aligned} M_0(t) &= \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\lambda_1(t)} & 0 \\ \sqrt{\lambda_2(t)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\lambda_3(t)} \end{pmatrix}, \\ M_1(t) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sqrt{\lambda_1(t)} \\ 0 & \sqrt{\lambda_2(t)} & 0 \\ \sqrt{\lambda_3(t)} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ M_2(t) &= \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_1(t)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\lambda_2(t)} \\ 0 & \sqrt{\lambda_3(t)} & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Mit dieser expliziten Form können die Kraus-Operatoren in die Berechnungen auf dem Quantencomputer implementiert werden.

2.3.3 Dynamik von Drei-Niveau-Systemen

Im zweiten Projektjahr wurde die Dynamik von Quantensystemen tiefergehend untersucht. Analytisch und mit Hilfe von klassischen Simulationen konnten Netzwerke aus drei Knoten analysiert werden. Auf dem Quantencomputer konnten Berechnungen für ein System aus drei Knoten ohne Schaden und für einen einzelnen Knoten mit Schaden und Reparatur durchgeführt werden.

2.3.3.1 Klassische Simulationen

Im Gegensatz zu Abschnitt 2.2 aus dem Zwischenbericht betrachten wir hier die Lösungen der vollen Mastergleichung, inklusive der kohärenten Wechselwirkung der Atome untereinander und der inkohärenten Beschädigungs- und Reparatur-Prozesse in jedem der Knoten. Ein weiterer Unterschied ist, dass wir nun eine kontinuierliche (continuous wave - CW), resonante Anregung eines der Knoten durch ein Laserfeld voraussetzen, anstelle einer Initialisierung durch einen kurzen Puls. Letzterer erfordert eine Re-Initialisierung nach jedem Beschädigungs-Reparatur-Zyklus. Eine solche Prozedur ist nicht nötig, wenn einer der Knoten CW getrieben ist.

Eine Mastergleichung kann in der Regel für beliebige Parameter der Dipol-Dipol Wechselwirkung, Zerfallsraten und Rabi-Frequenz des Lasers numerisch gelöst werden. Im Folgenden werden einige Beispiele für die Entwicklung einer Dichtematrix präsentiert. Wir nehmen an, dass zu Beginn alle Knoten im Grundzustand sind, d.h. bei $t = 0$ hat die Dichtematrix des Netzwerks nur ein nicht-verschwindendes Element, nämlich $\varrho_{111,111}(0) = 1$. Für jedes Set von Parameterwerten werden zwei Szenarien betrachtet: Knoten 1 oder 2 wird getrieben (Knoten 3 kann aus Symmetriegründen weggelassen werden). Zum Zeitpunkt $t \geq 0$ erhalten wir

$$\varrho(t) = e^{\mathcal{L}_T t} \varrho(0),$$

wobei der Liouville Operator des Netzwerks $\mathcal{L}_T$ jetzt auch den Liouville Operator $\mathcal{L}_L$ enthält, der entweder auf Knoten 1 oder 2 wirkt.

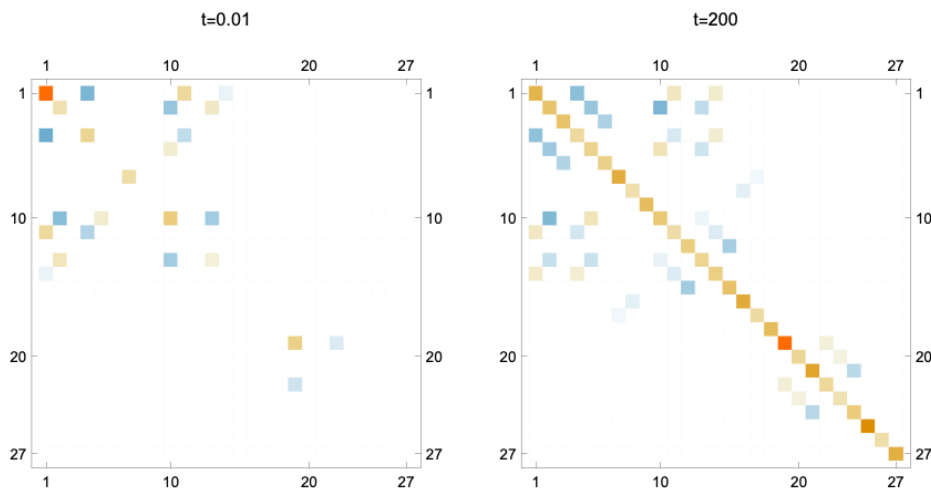


Abbildung 2: Momentaufnahmen (Matrix Plots) der Netzwerk Dichtematrix $\varrho(t)$ entwickelt bis zu den Zeiten $t=0.01, 200$ (in Einheiten von κ_1^{-1}). Das Laserfeld treibt Knoten 1 an. Die Achsenbeschriftungen bezeichnen die 27 Basiszustände des Drei-Knoten Netzwerks ($1 = |1,1,1\rangle$, $2 = |1,1,2\rangle$, ..., $27 = |3,3,3\rangle$). Die Parameterwerte (in Einheiten von κ_1) sind $\Omega = 10$, $\kappa_2 = 0.4$, $J_{12} = J_{23} = 10$. Für die Einträge außerhalb der Hauptdiagonale sind nur die reellen Anteile gezeigt. Warme (kalte) Farben zeigen positive (negative) Werte an.

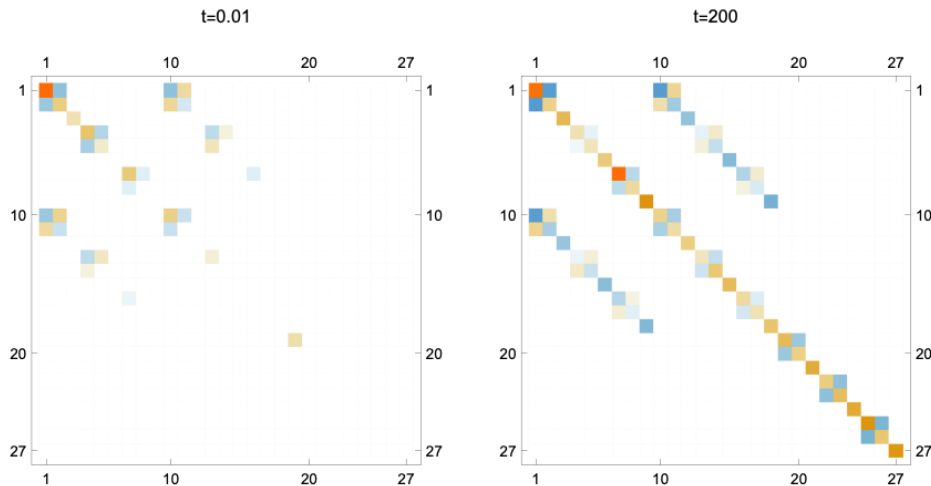


Abbildung 3: Wie in Abbildung 2, aber Knoten 2 wird mit dem Laser angetrieben.

Sowohl in Abbildung 2 als auch in Abbildung 3 beobachten wir, dass die Dichtematrix alle 27 Zustände des Drei-Niveau-Systems (Diagonalelemente der Matrix) zunehmend besetzt. Dies ist die Folge der Wirkung aller Liouville Operatoren, die in $\mathcal{L}_T$ enthalten sind. Neben den Hauptdiagonalelementen gibt es noch weitere Zustände, die ebenfalls angeregt werden. Durch die Anwendung des Laser Antriebs auf individuelle Knoten, unterscheiden sich die Dichtematrizen sehr voneinander. Wir untersuchen diese Unterschiede nun quantitativ indem wir uns die Zeitentwicklung der Niveau-Besetzungen ansehen.

Die Ergebnisse für die Fälle, dass Knoten 1 bzw. Knoten 2 mit dem Laser angetrieben werden sind in Abbildung 4 und Abbildung 5 dargestellt.

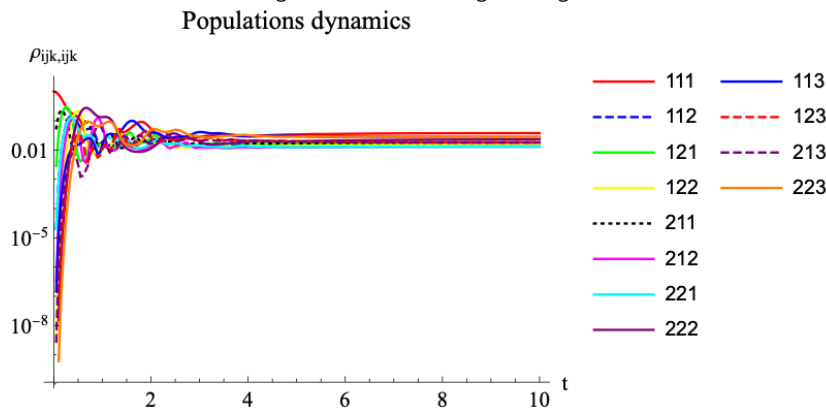


Abbildung 4: Zeitentwicklung (auf einer semi-logarithmischen Skala) der Besetzung von $\rho_{ijk,ijk} = \langle i, j, k | \rho | i, j, k \rangle$ der Netzwerk-Dichtematrix für den Fall, dass Knoten 1 mit dem Laser angetrieben wird. Die Parameterwerte sind die selben wie in Abbildung 2. Um die Abbildungen nicht zu überladen werden nur vier der 19 Zustände, die einen Defekt enthalten, gezeigt; alle 8 Zustände des ungestörten Qubit-Unterraums sind abgebildet.

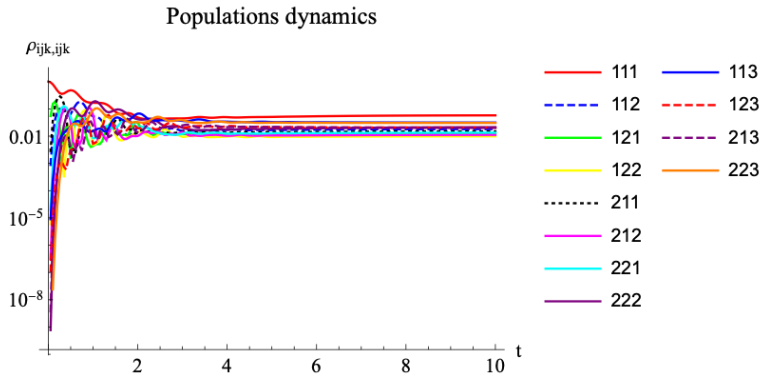


Abbildung 5: Wie in Abbildung 4, aber Knoten 2 wird mit dem Laser angetrieben.

In beiden Fällen beobachten wir, dass die Verteilung der Niveau-Besetzung des Quantennetzwerks sich einer homogenen Verteilung annähert. Wenn Knoten 1 angetrieben wird (Abbildung 4) bleibt der Grundzustand der am stärksten Besetzte, aber im Grenzfall für lange Zeiten gilt $\rho_{111,111} \approx 0.05$, was sehr nahe an der Besetzung der anderen Zustände ist, welche im Bereich $\approx 0.01 - 0.03$ liegen.

Wenn Knoten 2 angetrieben wird (Abbildung 5) ist die Verteilung der Besetzungen noch ungleicher als im vorherigen Fall, da die Besetzung der angeregten Zustände der äußeren Knoten durch destruktive Interferenz unterdrückt wird. Die Besetzung des Grundzustands erreicht den Wert $\rho_{111,111} \approx 0.2$ im Grenzfall für lange Zeiten. Entsprechend variieren die Besetzungen der anderen Niveaus im Bereich $\approx 0.01 - 0.06$. Dabei ist zu beachten, dass ein signifikanter Anteil der Gesamt-Besetzung in Zuständen mit einem oder mehreren Defekt-Niveaus bleibt, weil wir Parameter gewählt haben, sodass $\kappa_1 > \kappa_2$ für alle Knoten gilt (die Rate der Beschädigung ist höher als die Rate der Reparatur).

Im Kontext von Quantennetzwerken mit Defekten ist eine der wichtigsten Fragen wie die Resilienz des Netzwerks von der Topologie und den Parametern, welche die kohärente und inkohärente Entwicklung bestimmen, abhängt. Ein wichtiger Indikator für die Beantwortung dieser Frage ist durch Kenntnis der Dichtematrix des Netzwerks gegeben.

Die Dichtematrix liefert die vollständige Information über ein Quantensystem. In den oben beschriebenen Beispielen sehen wir, dass die Entwicklung des Netzwerks von seiner geometrischen Konfiguration abhängt, in unserem Fall davon ob der mittlere oder ein äußerer Knoten vom Laser angetrieben wird.

Unsere Ergebnisse zur Dichtematrix Entwicklung können genutzt werden, um ein Maß für die Resilienz eines Quantennetzwerks abzuleiten. Im besten Fall wäre dieses Maß mit der spezifischen Aufgabe, der das Netzwerk dient, verknüpft. Wenn das Netzwerk z.B. einen Quantenkanal, über den Quanteninformation übertragen wird, darstellt könnte man die Kapazität des Kanals in Betracht ziehen. In unserem Fall eines kleinen Netzwerks mit Defekten stellen wir ein einfaches Maß für die Resilienz durch die Besetzung von verschiedenen Niveaus dar. Ohne Defekte bleibt das Netzwerk im Qubit-Unterraum jedes Knotens. Wir können dieses ideale Netzwerk als Vergleich nutzen und ordnen ihm eine perfekte Resilienz zu. Perfekte Resilienz entspricht der Wahrscheinlichkeit $p_3 = 1$ (der Index bezieht sich auf die Anzahl an Knoten, die sich im Qubit-Unterraum befinden), dass das Netzwerk die Defekt-Niveaus nicht besetzt, d.h. es werden nur die 8 Qubit Zustände $|1,1,1\rangle, |1,1,2\rangle, |1,2,1\rangle, |1,2,2\rangle, |2,1,1\rangle, |2,1,2\rangle, |2,2,1\rangle, |2,2,2\rangle$ besetzt. In einem realistischeren Szenario, wenn wir den Beschädigungs- und Reparaturprozess in die Entwicklung des Netzwerks miteinbeziehen, werden auch Zustände mit einem oder mehreren Defekt-Niveaus besetzt und wir erhalten eine Reduktion der Resilienz. Werden

die Parameter wie in Abbildung 2 bzw. Abbildung 3 gewählt, ergibt sich $p_3 = 0.168$ bzw. $p_3 = 0.245$ wenn Knoten 1 bzw. Knoten 2 mit dem Laser angetrieben wird. Das bedeutet, dass für dieses Kriterium die Anordnung, bei der der mittlere Knoten angetrieben wird, resilienter ist.

Man könnte die Definition der Resilienz auch weniger restriktiv wählen, indem man einen Knoten im Defekt-Zustand erlaubt. Da zwei andere Knoten in diesem Fall im Qubit-Unterraum bleiben, ist das Netzwerk weiterhin teilweise funktionsfähig. Die Wahrscheinlichkeit p_2 bezieht sich auf die totale Besetzung von 12 Zuständen die genau ein Defekt-Niveau enthalten, also $|1,1,3\rangle, |1,2,3\rangle, |1,3,1\rangle, |1,3,2\rangle, |2,1,3\rangle, |2,2,3\rangle, |2,3,1\rangle, |2,3,2\rangle, |3,1,1\rangle, |3,1,2\rangle, |3,2,1\rangle, |3,2,2\rangle$. Für den Fall, dass Knoten 1 bzw. Knoten 2 angetrieben wird, erhalten wir $p_2 = 0.499$ und $p_2 = 0.393$.

Die Resilienz ist dann durch die totale Besetzung der Niveaus aus dem Qubit-Unterraum und der Besetzung der Niveaus mit einem Defekt gegeben, d.h. durch die Summe $p_2 + p_3$, was zu Werten 0.668 und 0.638 führt, wenn entweder Knoten 1 oder Knoten 2 angetrieben sind. Nun wäre die Konfiguration in der der mittlere Knoten angetrieben wird weniger robust. Daher sollte die Definition der Resilienz mit der Aufgabe des Netzwerks verbunden sein.

2.3.3.2 Berechnungen auf dem Quantencomputer

Mit den Ergebnissen aus 2.3.2 ist es auch möglich die Dynamik eines Drei-Niveau Systems mit Beschädigungs- und Reparaturprozessen auf einem Quantencomputer abzubilden. Dabei handelt es sich um einen einzelnen Knoten, welcher nicht in einem Netzwerk integriert ist. Es werden drei Qubits für die Berechnung benötigt, zwei um die drei Zustände des Knotens abbilden zu können und ein weiteres um die Umgebung zu simulieren.

Die expliziten Darstellungen der Kraus-Operatoren und der unitären Zeitentwicklungsoperatoren im erweiterten Hilbertraum sind in 2.3.2 gegeben. Die Krausoperatoren hängen von der Wahl des Anfangszustands ab. Dieser wurde als reiner Zustand gewählt, sodass die Wahrscheinlichkeit den Knoten im angeregten Zustand vorzufinden 1 ist, also

$$\rho(t=0) = |2\rangle\langle 2|.$$

Da es in diesem Fall keine weitere Dynamik außer den inkohärenten Beschädigungs- und Reparaturvorgängen gibt, wäre jeder Anteil des Systems, der sich im Grundzustand befände, unveränderlich. Bei einem Start im Defekt-Zustand gäbe es lediglich den Reparaturprozess.

Die Ergebnisse in Abbildung 6 zeigen, dass auf dem Quantencomputer die Dynamik qualitativ abgebildet werden kann. Die Zeitskalen werden korrekt abgebildet und auch die rauschbedingten Schwankungen in den Kurven sind gering genug um den Verlauf des Erwartungswertes erkennen zu können. Allerdings gibt es einen Versatz in allen Kurven, der schon zum Zeitpunkt $t = 0$ sichtbar ist und über die gesamte Zeitspanne vorhanden bleibt. Hierbei scheint es sich um einen systematischen Fehler zu handeln, da insbesondere die asymptotisch abfallenden Kurven für den angeregten und den Defekt-Zustand sich für große Zeiten demselben Wert anzunähern zu scheinen.

Auch zu beachten ist die Tatsache, dass sich die gemessenen Wahrscheinlichkeiten für die drei Zustände des Knotens nicht zu 1 addieren. Das kommt daher, dass das System insgesamt acht Zustände hat und die Ergebnisse aus drei Quantenschaltkreisen addiert werden müssen. Durch die Addition erhält man eine Gesamtwahrscheinlichkeit von 3, sodass bei Messfehlern, z.B. wenn das Hilfsqubit im Zustand $|2\rangle$ ist, aber $|1\rangle$ gemessen wird, die unphysikalischen Zustände, welche eigentlich durch die Projektion hätten vernachlässigt werden sollen, fälschlicherweise als einer der physikalischen Zustände erkannt werden.

In Abbildung 7 sieht man außerdem, dass die Ergebnisse nicht sehr zuverlässig sind. Das selbe Skript, das für die Ergebnisse in Abbildung 6 genutzt wurde, hat einen Tag später lediglich Rauschen produziert. Beide Ergebnisse konnten an unterschiedlichen Tagen reproduziert werden, ohne jedoch herauszufinden was genau zu diesen Abweichungen führt. Mögliche Gründe könnten die Nutzung des Quantencomputers zu einer Zeit als die Kalibrierung der Qubits überfällig war sein oder dass eine Mehrfachnutzung des Systems stattgefunden hat, sodass unser Quantenschaltkreis auf drei schlecht kalibrierten Qubits ausgeführt wurde.

Weitere Untersuchungen zu Fehlern in den Rechenergebnissen des Quantencomputers sind im nächsten Abschnitt zusammengefasst.

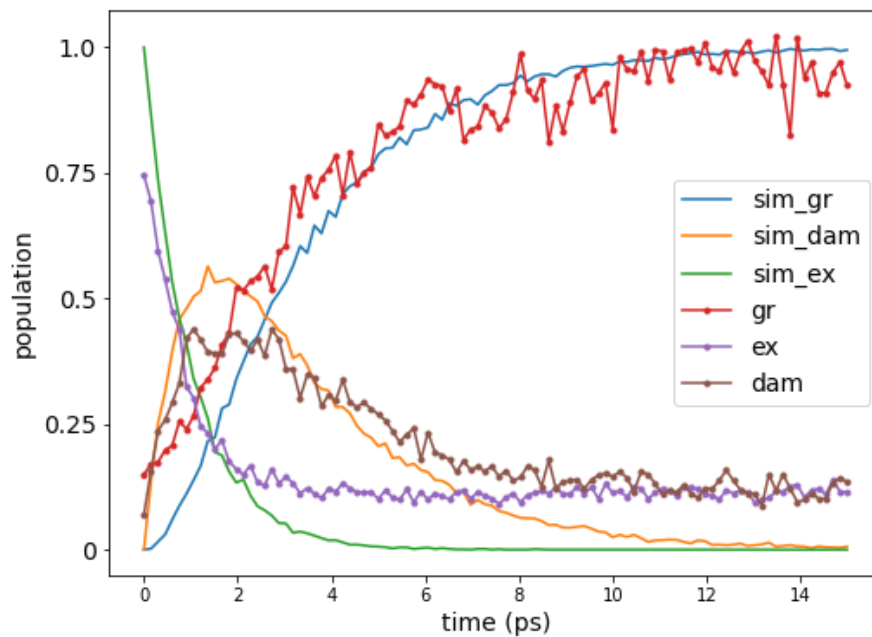


Abbildung 6: Besetzung von Grundzustand (gr), angeregtem Zustand (ex) und Defekt-Zustand (dam) berechnet mit dem IBMQC (Linien mit Messpunkten) und Ergebnisse des QASM-Simulators (durchgezogene Linien). Das Verhältnis der Raten für Beschädigung und Reparatur ist $\kappa_2 = 0.4 * \kappa_1$.

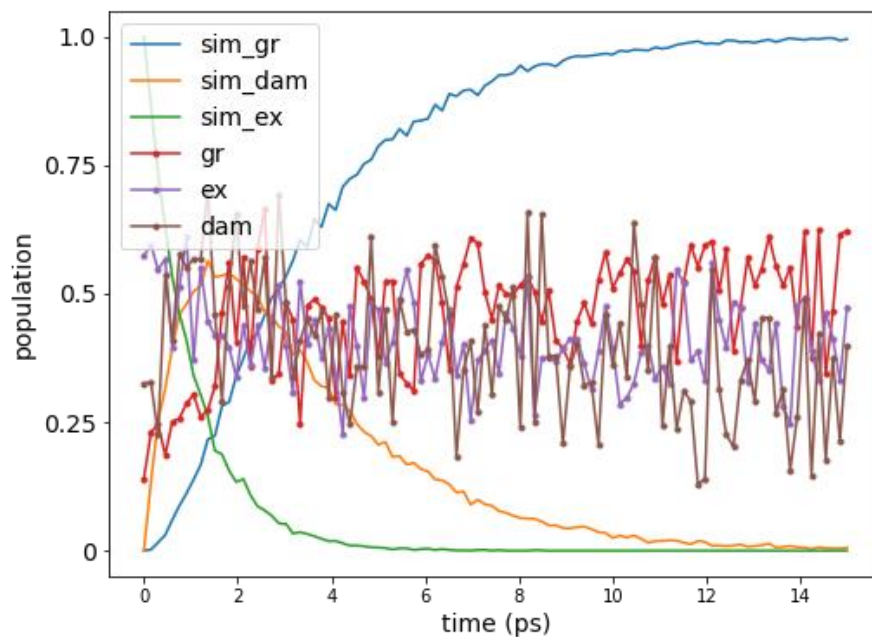


Abbildung 7: Die gleiche Berechnung wie in Abbildung 6, einen Tag später durchgeführt.

2.4 Quantenfehlerkorrektur (AP 4)

Das Arbeitspaket AP 4 lief von M19 bis M24. Eine konkrete Umsetzung einer Quantenfehlerkorrektur für das beschriebene Quantennetzwerk konnte nicht umgesetzt werden, da die Implementierung wesentlich komplexer ausfiel als ursprünglich angenommen. Stattdessen wurden eine qualitative und quantitative Untersuchung der Quantenfehler durchgeführt. Zudem wurde eine universale Zerlegung der großen unitären Matrix in elementare Gatter angestrebt, um die Schwankungen zwischen den einzelnen Realisierungen innerhalb eines Simulationslaufes zu minimieren. Innerhalb der Laufzeit konnte jedoch keine Lösung gefunden werden.

Die Ergebnisse in diesem Kapitel wurden für das ungestörte Drei-Knoten-Netzwerk erzeugt, d.h. der Übergang in den dritten gestörten Zustand wurde nicht betrachtet.

2.4.1 Quantifizierung der Quantenfehler

Berechnungen auf dem Quantencomputer unterliegen unvermeidbaren Quantenfehlern. Um die Quantenfehler zu untersuchen und zu quantifizieren, werden die Rechenergebnisse des Quantencomputers in Ehningen (IBMQC) mit Simulationsergebnissen des QASM-Simulators verglichen. Es wird angenommen, dass die QASM-Simulationen fehlerfrei sind und das exakte Ergebnis wiedergeben.

Zunächst wird die zeitliche Entwicklung der Zustände nach einer Puls-Anregung der Zustände betrachtet. In Abbildung 8 ist das Ergebnis der Simulation und des IBMQC für die zeitliche Entwicklung des $|2,1,1\rangle$ Zustandes zu sehen. Pro Zeitpunkt wurden 10000 Messwiederholungen durchgeführt. Für jeden Zeitschritt müssen die Operatoren mit Hilfe von Transpilationsmethoden in Quantenschaltkreise umgewandelt werden (siehe auch Abschnitt 2.3). Die Quantenschaltkreise erreichen eine durchschnittliche Tiefe von 320 Gattern.

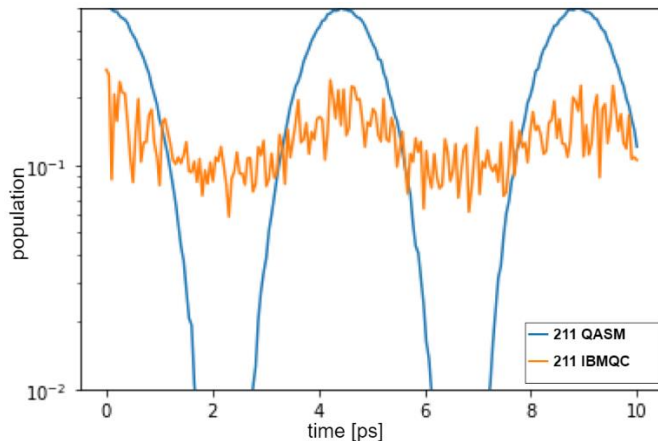


Abbildung 8: Zeitliche Entwicklung des $|2,1,1\rangle$ Zustandes nach Pulsanregung der Zustände, berechnet mit dem IBMQC (orange) und QASM-Simulator (blau).

Die Qualität der Ergebnisse des Quantencomputers lässt sich generell durch die Erhöhung der Anzahl der Messwiederholungen verbessern. In Abbildung 9 wird die zeitliche Entwicklung des $|2,1,1\rangle$ Zustandes für unterschiedliche Anzahlen von Wiederholungen pro Messzeitpunkt gezeigt. Eine deutliche Verbesserung zeigt sich durch die Erhöhung von 10 auf 50 Wiederholungen. Allerdings ist auch zu sehen, dass sich bei der weiteren Erhöhung, selbst bei 2000 Wiederholungen, keine weitere deutliche Verbesserung einstellt. Um diesen Effekt genauer zu quantifizieren, wird die Wurzel des mittleren Fehlerquadrats für die Abweichung der Messungen von der Simulation berechnet und in Abbildung 10 dargestellt.

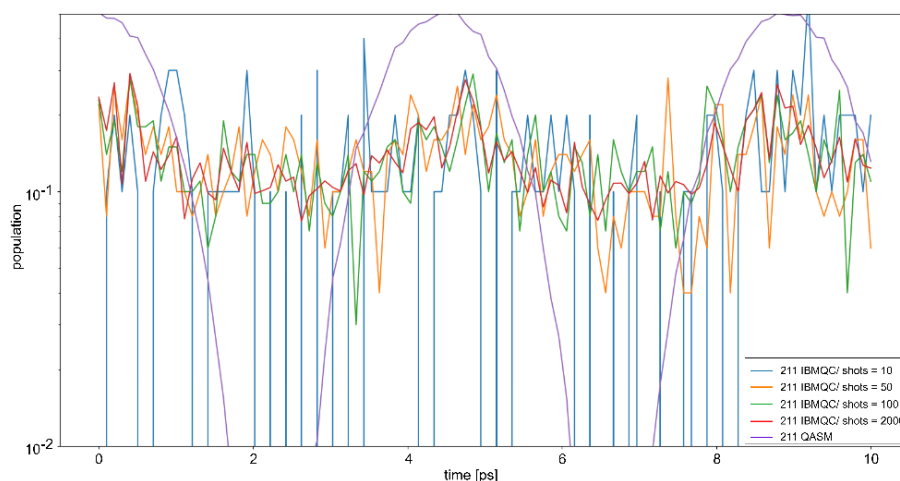
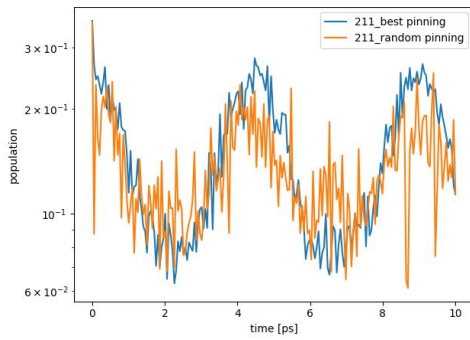


Abbildung 9: Zeitliche Entwicklung des $|2,1,1\rangle$ Zustandes nach einer Pulsanregung für den IBMQC für verschiedene Anzahlen an Messwiederholungen pro Messzeitpunkt und die QASM-Simulation.

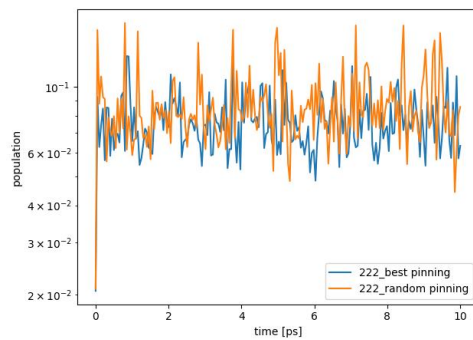
[illegible]

Eine Auswahl der Qubits, die für die Berechnung genutzt werden, findet bereits während des Transpilationsprozesses statt und wird als Attribut im auszuführenden Job gespeichert. Die Standardeinstellung des Systems beinhaltet eine zufällige Auswahl der Qubits. Wichtig dabei ist allerdings, dass die Qubits unterschiedliche Fehlerraten haben, die sich zeitlich ändern können. Es ist daher von Vorteil, eine vorgeschaltete Zustandsabfrage für die Qubits durchzuführen und die Auswahl der Qubits basierend auf diesen Ergebnissen manuell zu setzen.

17 | 22



(c)

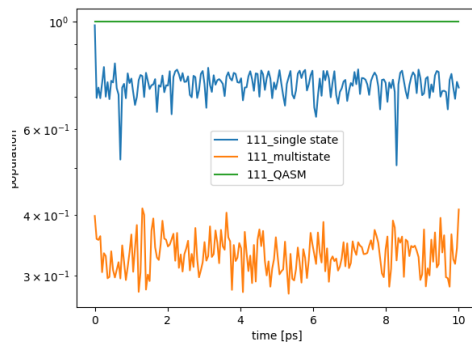


(d)

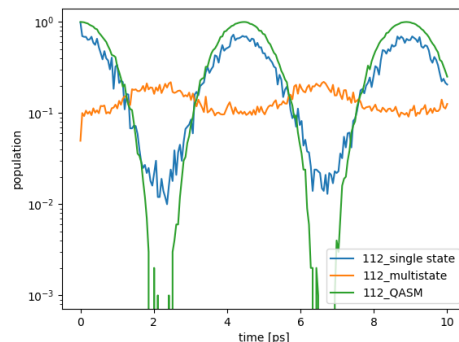
Abbildung 12: Ergebnisse des IBMQC für die zeitliche Entwicklung der Zustände $|1,1,1\rangle$ (a), $|1,1,2\rangle$ (b), $|2,1,1\rangle$ (c) und $|2,2,2\rangle$ (d) nach Pulsanregung des Systems für eine zufällige Wahl der Qubits (random pinning – Orange) und Auswahl der Qubits mit kleinster Fehlerrate (best pinning – Blau).

Ein weiterer wichtiger Einfluss auf die Quantenfehler ist durch die Tiefe der Quantenschaltkreise gegeben, da tiefere Schaltkreise mehr Gatter enthalten, welche zusätzliche Fehler hervorrufen. Einen besonderen Einfluss auf die Fehler haben die CNOT-Gatter, welche zu den Basis-Gattern gehören und beim Transpilationsprozess in vielfacher Weise eingesetzt werden.

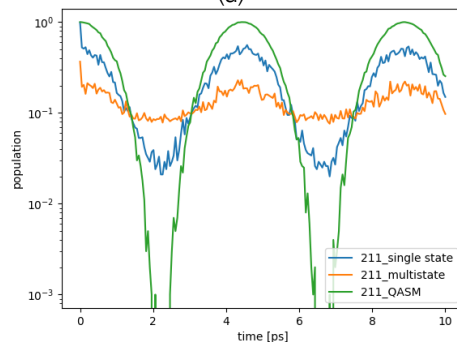
Im Projekt wurde zunächst eine Pulsanregung mehrerer Zustände durchgeführt. Eine Strategie, um die Tiefe des Quantenschaltkreises zu reduzieren ist es den Startzustand so zu wählen, dass er aus dem Grundzustand mit wenigen Gattern erzeugt werden kann. Durch explizite Auswahl und Anregung von nur jeweils einem der 8 Zustände kann die durchschnittliche Tiefe von circa 320 Gattern auf durchschnittliche 205 Gatter reduziert werden. Ergebnisse des IBMQC nach Anregung eines einzelnen Zustandes und nach Pulsanregung werden in Abbildung 13 gezeigt. Die absolute Skala (Normierung) unterscheidet sich im Falle der Pulsanregung und durch die gemischte Anregung mehrerer Zustände zum Startzeitpunkt.



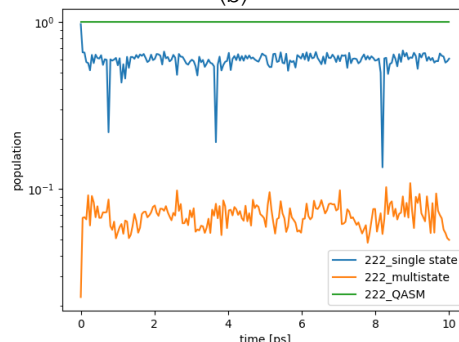
(a)



(b)



(c)



(d)

Abbildung 13: Ergebnisse des IBMQC nach Einzelanregung eines Basiszustandes (blau) und nach gemischter Pulsanregung mehrerer Zustände (orange) für die Zustände $|1,1,1\rangle$ (a), $|1,1,2\rangle$ (b), $|2,1,1\rangle$ (c) und $|2,2,2\rangle$ (d). Das Simulationsergebnis (grün) entspricht der Anregung des Einzelzustandes.

Überblick der wissenschaftlichen
Arbeiten

Im initialen Zeitpunkt ($t=0$) liegt das Ergebnis des IBMQC für die Einzelanregung nur minimal unter der Simulation. Der Quantenschaltkreis ist hier nur 2 Gatter tief. Zu sehen ist allerdings, dass es bereits nach dem initialen Zeitschritt zu einer Verschiebung der Zustände kommt. Das wird insbesondere bei den zeitlich konstanten Zuständen $|1,1,1\rangle$ und $|2,2,2\rangle$ deutlich und liegt an dem Sprung der Tiefe auf circa 200 Gatter. Für die Transpilation werden vordefinierte Funktionen in Qiskit verwendet. Die Parameter, die diesen Prozess steuern wurden dabei in verschiedene Richtungen verändert. Es ergab sich dabei jedoch keine signifikante Verbesserung in den Ergebnissen.

Zusammenfassend beeinflussen folgende Faktoren die Größe des Quantenfehlers:

- Anzahl der Messwiederholungen: die Konvergenz der Ergebnisse lässt sich durch eine höhere Anzahl von Messungen verbessern, allerdings muss die Erhöhung der Rechenzeit entgegengesetzt werden. Die optimale Anzahl der Wiederholungen muss daher unter Berücksichtigung der beiden Faktoren bestimmt werden.
- Tiefe des Quantenschaltkreises: die Fehleranfälligkeit der Messungen wächst mit zunehmender Tiefe des Quantenschaltkreises.
- CNOT-Gatter: CNOT-Gatter sind eine Hauptquelle von Quantenfehlern. Sie werden bei der Transpilation der Quantenoperatoren generiert. Es ist daher wichtig diesen Prozess dahingehend zu optimieren.
- Qualität der Qubits: Die aktuelle Fehlerrate der Qubits des Quantencomputers lässt sich abfragen und es sollten die Qubits mit den geringsten Fehlerraten für die Berechnung genutzt werden.

3 Ausblick

Ausblick

Im Januar 2023 startet das Folgeprojekt SEQUOIA End-to-End. Die Partner aus EFFEKTIF haben sich hierbei dem deutlich größeren Konsortium aus SEQUOIA angeschlossen, um gemeinsam weiter an der Fragestellung zur Resilienzbewertung von kritischen Infrastrukturen mit dem Quantencomputer zu forschen. Die Fragestellung wird als Use-Case im Energiesektor in SEQUOIA End-to-End integriert und es wird eine Steigerung insbesondere der technischen Kompetenzen (z.B. Transpilationsprozesse) durch die intensive Zusammenarbeit im großen Konsortium erhofft. Desweiteren soll ein größerer Schwerpunkt in der Überprüfung der Nutzbarkeit etablierter Optimierungsalgorithmen für die Identifikation kritischer Netzwerkparameter liegen.

4 Anhang

Anhang

4.1 Publikationen

Bisher sind im Projekt keine Publikationen entstanden, aber eine Gemeinschaftspublikation der Universität Freiburg und des Fraunhofer EMI ist in Bearbeitung.

4.2 Projektbezogene Patentanmeldungen

Es wurden keine Patente angemeldet.

4.3 Vorträge

Der Anwendungsfall dieses Projekts wird im Rahmen eines Vortrags auf der Messe „LASER World of PHOTONICS“ in München am Di., 26. Apr. 2022 – Fr., 29. Apr. 2022 gemeinsam mit den anderen Themen, die das Fraunhofer Kompetenznetzwerk Quantencomputing bearbeitet, in einer gemeinsamen Präsentation vorgestellt.

Das Projekt EFFEKTIF wird von Corinna Köpke bei IBM Ehningen im Juni 2022 vorgestellt in der Reihe ‚Quantensprünge im Maschinenbau‘. Die Veranstaltung wurde durch das VDMA Forum Quantentechnologien und Photonik und dem VDMA Baden-Württemberg, Allianz Industrie 4.0 Baden-Württemberg organisiert.

Teilnahme an der KQCBW – Developer Conference vom 20.10.2022 bis 21.10.2022 in Ehningen. Gezeigt wurden eine Projektvorstellung von EFFEKTIF von Mirjam Fehling-Kaschek, der Vortrag „Improving Efficiency of Stability Analysis and Error Correction Protocols for Classical Interconnected Critical Infrastructure Networks“ von Christoph Brockt und ein Poster „Quantum Computers for Critical Infrastructure: A Hands-on Experience in the Project EFFEKTIF“ von Corinna Köpke.

4.4 Im Themenfeld Quantencomputing geschulte Personen

An der Schulungsreihe Quantencomputing IAO – IAF nahmen die folgenden Personen des Fraunhofer EMI teil:

- Dr. Christoph Brockt
- Dr. Corinna Köpke
- Andreas Weber
- Aishvarya Kumar Jain

Die Universität Freiburg hat im Rahmen von EFFEKTIF folgende Studenten im Umgang mit Quantencomputern geschult:

- Asmita Datta (Praktikantin im Masterstudium Physik): 06-07.2022
- Leo Tobias Küchler (Bachelor-Student Physik): 12.2022.

4.5 Am Projekt beteiligte Industriepartner

Über die gesamte Projektlaufzeit wurde das Konsortium durch den assoziierten Unternehmenspartner Überlandwerk Mittelbaden GmbH & Co. KG begleitet. Es fanden

zwei Industriebeiratstreffen am 26.11.2021 und am 24.10.2022 statt. Dabei wurden dem Industriepartner die aktuellen Arbeiten präsentiert und mögliche Ausrichtungen der weiteren Schritte diskutiert. Die Rückmeldungen vom Industriepartner stellten einen wertvollen Beitrag für die wissenschaftlichen Arbeiten, insbesondere der Resilienzbewertung kritischer Infrastrukturen, dar.

Anhang
