

Praktické aspekty kvantového počítání

VOJTĚCH VAŠINA, MARTIN FRIÁK

Ústav fyziky materiálů, v. v. i., Akademie věd České republiky, Brno

1. Úvod

Klasické počítače jsou v současnosti neodmyslitelnou součástí vědy, průmyslu i našeho běžného života. Výpočetní náročnost některých úloh ale neroste lineárně a k jejich řešení v „rozumném“ čase nepostačují ani ty největší a nejvýkonnější superpočítače. Příkladem úloh, jejichž náročnost roste až exponenciálně, jsou např. složité optimalizační problémy, modelování fyzikálních systémů, nebo rozklad velkých čísel na součin prvočísel. Efektivní řešení těchto úloh by přispělo k rychlejšímu rozvoji vědy a techniky, ale naše výpočetní kapacity na ně nestačí a to ani dnes, ani v blízké budoucnosti příštích desetiletí.

Nadějí je nastupující technologie kvantových počítačů, které nabízejí až exponenciální zrychlení některých výpočtů. Několik společností (např. IBM, Google, Microsoft, ...) vyvíjí nejen kvantové počítače, tedy hardware, ale i vhodný software. Společnost IBM nabízí momentálně veřejnosti možnost připojit se k jejich kvantovým počítačům a spustit na nich výpočty o souhrnné délce 10 minut každý měsíc. Tento článek obsahuje krátký návod, jak se přihlásit na platformu IBM a připojit se ke kvantovým počítačům, naprogramovat na nich jednoduchý kvantový obvod, a jak na nich spustit krátký výpočet. Je třeba upozornit, že kvantové počítání je oborem na pomezí kvantové fyziky, matematiky a informatiky a tento text nemá ambici být ani úvodem do celé složité problematiky.

2. Od bitů klasických ke kvantovým

Základní jednotkou informace je u klasických počítačů tzv. bit, který může nabývat právě jedné ze dvou navzájem se vylučujících hodnot, které typicky označujeme 0 a 1. Kvantové počítače pracují s tzv. kvantovými bity, zkráceně qubity (čteno „kjübity“). Qubity jsou uzavřené kvantové systémy, které se řídí zákony kvantové mechaniky a kvůli tomu nám může

jejich chování připadat značně neintuitivní. Stav jednoho qubitu lze popsat pomocí abstraktního vektorového prostoru, jehož báze vektory se označují jako $|0\rangle$ a $|1\rangle$ a jedná se o zkrácený zápis (tzv. Diracovu notaci) sloupcových vektorů:

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (1)$$

kteří jsou z matematického hlediska ortogonální (jejich skalární součin je roven nule). Qubity se mohou nacházet v těchto dvou stavech, ale také ve stavu tzv. superpozice [2]. Jedná se o kvantový stav, který je lineární kombinací báze vektorů:

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

kde α a β jsou komplexní čísla, kterým se říká amplitudy. V jazyce klasických počítačů bychom mohli (nepřesně) říci, že báze vektory $|0\rangle$, $|1\rangle$ z (1) jsou vzájemně „opačné“ podobně jako jsou hodnoty 0 a 1 opačné v binární soustavě u klasických bitů. V kvantových systémech se u qubitů ale tyto dva stavy nevylučují a qubit v superpozici znamená, že kvantový bit nabývá hodnoty 0 i 1 zároveň, což u klasických bitů není možné.

Zásadní odlišností kvantových počítačů od klasických je to, že qubit je v superpozici pouze dokud se vyvíjí v čase nerušený okolím – dokud nedojde ke změření jeho stavu. Při změření stavu dojde k tzv. kolapsu vlnové funkce, viz např. kniha [3], a qubit ze stavu superpozice „zkolabuje“ do jednoho z báze vektorů s pravděpodobností, kterou udávají druhé mocniny absolutních hodnot amplitud – komplexních čísel α a β , tedy

- $|\alpha|^2$ udává pravděpodobnost, s jakou je $|\psi\rangle$ nalezen/naměřen ve stavu $|0\rangle$
- $|\beta|^2$ udává pravděpodobnost, s jakou je $|\psi\rangle$ nalezen/naměřen ve stavu $|1\rangle$.

Zjednodušeně bychom mohli říct, že se změřením stane z kvantového qubitu efektivně klasický bit. Toto chování je jedním z postulátů kvantové mechaniky, jak uvádí např. Zettili [3]. Výsledek měření stavu qubitu je pravděpodobnostní (nevíme, jakou hodnotu ze dvou možností naměříme, víme pouze s jakou pravděpodobností bude nějaká hodnota naměřena). Součet pravděpodobností obou možných hodnot je roven jedné:

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1.$$

Protože jsou amplitudy α a β komplexní čísla a platí výše uvedené o součtu kvadrátů jejich velikostí, lze různé stavy qubitů zviditelnit jako body na povrchu jednotkové koule, která se říká Blochova sféra.

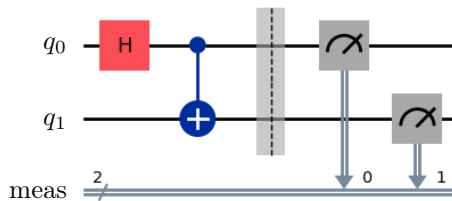
Výše uvedené je pouze velmi zjednodušený a základní popis qubitů. Pro hlubší pochopení problematiky doporučujeme např. následující zdroje:

- knihu (v angličtině) autorů Nielsena and Chuanga [2],
- stránky (v angličtině) [IBM Quantum Learning](#), které obsahují kompletní kurzy a další výukové návody pro práci s kvantovými počítači,
- česky na youtube např. přednášku z [Mezinárodního dne kvantové fyziky 2025](#) na Hvězdárně a planetáriu v Brně. Dvě přednášky o tom, jak kvantové počítače fungují, a co se s nimi dá počítat.

3. Jednoduchý kvantový obvod

Podobně jako klasické obvody sestávají z hradel působících na klasické bity v obvodu klasického počítače, kvantové obvody se skládají z kvantových hradel či bran (tento výraz je přímým překladem anglického termínu „gate“), které působí na jeden či více qubitů. Působení klasických i kvantových hradel/bran na bity či qubity lze matematicky popsat pomocí lineární algebry, což si u kvantových obvodů nyní ukážeme.

Pro ilustraci kvantového počítání vybereme jednoduchý kvantový obvod, obr. 1, který se skládá ze dvou qubitů, které jsou označeny q_0 a q_1 . Kvantový obvod obsahuje informaci o časovém vývoji stavu qubitů s tím, že časový vývoj probíhá z levé strany obr. 1 do prava. Často jsou všechny qubity na začátku výpočtu ve stavu 0, což bude i náš případ.



Obr. 1 Jednoduchý kvantový obvod dvou qubitů q_0 a q_1 , které jsou oba na počátku (na levé straně obrázku) ve stavu 0. Na první z qubitů q_0 je následně aplikována tzv. Hadamardova brána, která jej převede do superpozice stavů $|0\rangle$ a $|1\rangle$. Qubity jsou pak provázány pomocí brány CNOT a následně změřeny a hodnoty jsou odečteny (označeno zkráceně „meas“ z anglického *measurements*).

Na qubit q_0 je aplikována tzv. Hadamardova brána, která převede tento qubit z počátečního stavu $|0\rangle$ do superpozice. Pokud by byl změřen, bude nalezen ve stavu $|0\rangle$ s pravděpodobností 50 % a ve stavu $|1\rangle$ rovněž s pravděpodobností 50 %. Následně je na oba qubity aplikována CNOT brána, která stav obou qubitů tzv. prováže. CNOT brána překlápí stav qubitů q_1 z $|0\rangle$ na $|1\rangle$ pokud je qubit q_0 ve stavu $|1\rangle$. Pokud je qubit q_0 ve stavu $|0\rangle$, stav qubitů q_1 zůstane nezměněný (v tomto případě $|0\rangle$). Nakonec jsou aplikována měření na oba dva qubity a změřený stav je přenesen na nosič klasické informace s názvem *meas* z anglického slova *measurements*.

Výsledný stav obvodu na obr. 1 je možné dopočítat analyticky. Pro výpočet je třeba znát několik informací. Předně stav více (zde dvou) qubitů je na počátku dán tenzorovým součinem [5] stavů $|0\rangle$ jednotlivých qubitů:

$$|00\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\ 0 \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (2)$$

Působení Hadamardovy brány na qubit popsaný 2-složkovým vektorem lze matematicky popsat pomocí následující 2×2 matice [4]:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

Působení CNOT brány, která působí na dva qubity popsané 4-složkovým vektorem (např. v rovnici (2) výše), lze zapsat pomocí matice 4×4 :

$$\text{CNOT} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Analyticky lze vyřešit stav kvantového obvodu na obr. 1 tak, že popíšeme jednotlivé prvky obvodu z levé strany směrem doprava, což je směr časového vývoje: Na qubit q_0 aplikujeme Hadamardovu bránu, s qubitem

q_1 se v tento okamžik nic neděje, a proto na něj aplikujeme matici identity I , aby došlo k zachování jeho stavu. Společnou akci Hadamardovy brány spolu s maticí identity, kterou označíme jako operátor U , vyjádříme pomocí jejich tenzorového součinu:

$$\begin{aligned}
 U = H \otimes I &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} & 1 \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \\ 1 \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} & -1 \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (3)
 \end{aligned}$$

Stav obvodu po společné akci Hadamardovi brány na qubit q_0 a identity na qubit q_1 lze získat vynásobením stavu $|00\rangle$ maticí U z rovnice (3):

$$\begin{aligned}
 |\psi_1\rangle = U|00\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |10\rangle)
 \end{aligned}$$

Konečný stav kvantového registru $|\psi_2\rangle$ získáme aplikací CNOT brány na stav obvodu $|\psi_1\rangle$ takto:

$$\begin{aligned}
|\psi_2\rangle &= \text{CNOT}|\psi_1\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \right) = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} \quad (4)
\end{aligned}$$

Ze stavu obvodu $|\psi_2\rangle$ ve vztahu (4) je zřejmé, že oba stavy $|00\rangle$ i $|11\rangle$ jsou stejně pravděpodobné. Pravděpodobnost obou stavů lze vypočítat: $(\frac{1}{\sqrt{2}})^2$, a je tedy rovna $\frac{1}{2}$. Nyní naprogramujeme a spustíme stejný obvod nejprve na simulátoru ideálního kvantového počítače a poté na reálném kvantovém počítači, u kterého už předpokládáme vliv šumu a tedy výsledky zatížené chybou. Z měření stavu jednoho qubitu můžeme dostat výsledek pouze $|0\rangle$ nebo $|1\rangle$, spustíme tedy obvod několikrát a budeme sledovat pravděpodobnosti a to, zda získané výsledky odpovídají analytickému řešení.

4. Softwarový základ pro programování

Pro programování kvantových počítačů je nejprve nutné zvolit si a stáhnout vhodný editor kódu. Při programování kvantových počítačů budeme využívat programovací jazyk Python a knihovnu funkcí Qiskit. Je tedy nutné zvolit takový editor kódu, který umožňuje pracovat s programovacím jazykem Python. Autor článku využíval [Visual Studio Code](#), kvůli vestavěné podpoře jazyka Python, široké uživatelské komunitě a obsáhlé dokumentaci. Dále je nutné nainstalovat si programovací jazyk [Python](#). Pro správu stažených knihoven funkcí autor doporučuje dodatečně stáhnout software [Anaconda](#), který v našem případě poslouží pro instalaci a následnou správu potřebných knihoven.

Nyní uživatel provede vytvoření prostředí a instalaci potřebných knihoven. Nejprve otevřete *Anaconda Prompt* a zadejte příkaz `conda create env --name` a za tento příkaz zadejte jméno vašeho prostředí. Pro další příkazy je vhodné [conda cheat sheet](#). Po vytvoření prostředí zadejte příkaz `conda activate` a opět zadejte jméno vašeho prostředí. Nyní jste v prostředí,

kteře budete využívat pro výpočty na kvantových počítačích, a můžete začít instalovat potřebné knihovny funkcí. Tyto knihovny budete instalovat pomocí příkazů:

- `conda install ipykernel`
- `conda install pip`
- `pip install qiskit`
- `pip install qiskit_ibm_runtime`
- `pip install matplotlib`
- `pip install qiskit_aer`
- `pip install pylatexenc`

5. Příklad spuštění výpočtu na simulařu ideálního kvantového počítače

Nejprve je nutné vytvořit samotný program v softwaru Visual Studio, pro výukové účely je vhodné zvolit Jupyter Notebook. To uživatel provede tak, že pojmenuje soubor s koncovkou *.ipynb*.

Na začátku je nutné nainportovat jednotlivé knihovny funkcí:

```
from qiskit import QuantumCircuit
from qiskit.primitives import StatevectorSampler
from qiskit.visualization import plot_histogram
```

Nyní vytvoříme obvod se dvěma qubity, aplikujeme Hadamardovu bránu na qubit q_0 a CNOT brány na qubity q_0 a q_1 . Na závěr aplikujeme měření na všechny qubity v obvodu:

```
qc = QuantumCircuit(2)
qc.h(0)
qc.cx(0,1)
qc.measure_all()
```

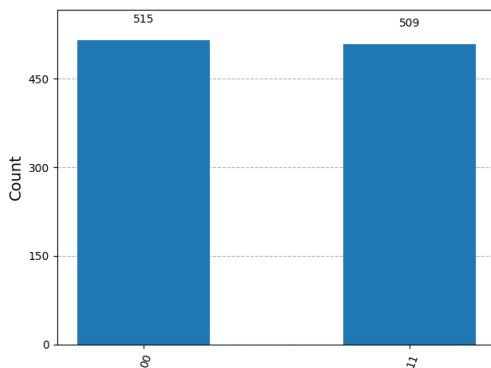
Obvod si může uživatel i jednoduše vykreslit, výsledek bude obr. 1.

```
qc.draw("mpl")
```

Nyní spustíme kód, který obvod vždy spustí a nakonec změří stav obou qubitů a následně vykreslí histogram četnosti. Počet těchto cyklů lze nastavit změnou parametru *shots*=.

```
sampler = StatevectorSampler()
job = sampler.run([qc],shots=1024)
pub_result = job.result()[0]
counts = pub_result.data.meas.get_counts()
plot_histogram(counts)
```

Z výsledků zobrazených na obr. 2 je patrná statistická povaha výsledků z kvantových počítačů. Při měření byly změřeny stavy $|00\rangle$ a $|11\rangle$ ale do výsledků byla zanesena určitá statistická chyba, a tak nejsou změřené stavy přesně v poměru 50/50.

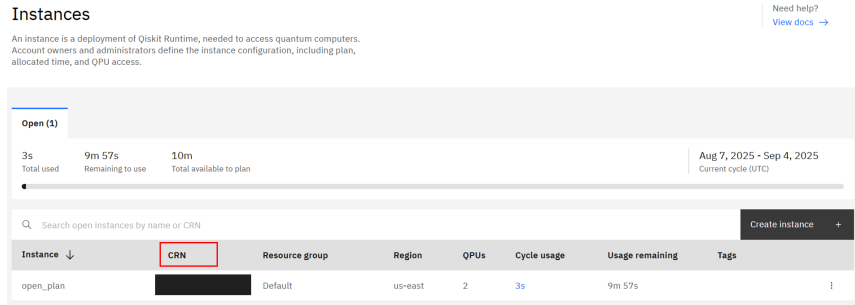


Obr. 2 Výsledky ze simulátoru běhu ideálního kvantového počítače.

Nyní spustíme výpočet na kvantovém hardwaru firmy IBM. Zřízení přístupu a další potřebné formální kroky jsou v dodatku na konci tohoto článku.

6. Příklad spuštění výpočtu na reálném kvantovém počítači

Pro spuštění na reálném kvantovém počítači je nejprve nutné identifikovat se svým unikátním API klíčem a názvem instance, viz dodatek na konci tohoto článku, kde je vysvětlen postup zřízení účtu na serveru IBM Quantum Platform a následně i tzv. Instancí a API klíče. Místo názvu instance lze vložit CRN, které uživatel najde v sekci Instances na IBM Quantum Platform podle obr. 3.



The screenshot shows the 'Instances' page on the IBM Quantum Platform. At the top, there is a summary of instance usage: 3s total used, 9m 57s remaining to use, and 10m total available to plan. Below this is a search bar and a table of open instances. The table has columns for Instance, CRN, Resource group, Region, QPUs, Cycle usage, Usage remaining, and Tags. The 'CRN' column is highlighted with a red box, indicating where the user's CRN should be entered.

Instance	CRN	Resource group	Region	QPUs	Cycle usage	Usage remaining	Tags
open_plan		Default	us-east	2	3s	9m 57s	

Obr. 3 Ilustrace možnosti, kdy je místo názvu instance vloženo CRN, které uživatel najde v sekci Instances na IBM Quantum Platform.

Opět začneme nainportováním nezbytných funkcí.

```
from qiskit import QuantumCircuit
from qiskit_ibm_runtime import QiskitRuntimeService
from qiskit_ibm_runtime import SamplerV2
from qiskit.primitives import StatevectorSampler
from qiskit.visualization import plot_histogram
from qiskit.transpiler.preset_passmanagers import \
    generate_preset_pass_manager
```

Nyní je nutné vložit API klíč a CRN do následujícího kódu, následně se jimi identifikovat a zvolit konkrétní kvantový počítač. Kvantové počítače, které jsou dostupné uživateli v rámci jeho *open* plánu, se zobrazí na stránce [Compute Resources](#). Pro účel publikace byl vybrán kvantový počítač *ibm_brisbane* s procesorem *Eagle r3* se 127 qubity.

```

token = 'API_key'
instance = 'CRN'
service = \
    QiskitRuntimeService(channel='ibm_cloud',instance=instance, \
        token=token)
backend = service.backend('ibm_brisbane')

```

Tímto vytvoříme stejný kvantový obvod, který byl použit v sekci 5.

```

qc = QuantumCircuit(2)
qc.h(0)
qc.cx(0,1)
qc.measure_all()

```

Vytvořený kvantový obvod je nutné „přeložit“ tak, aby byl spustitelný na konkrétním kvantovém počítači. Např. kvantový počítač *ibm_brisbane* je schopen manipulovat qubity pouze s bránami *ecr*, *id*, *rz*, *sx*, *x* [1] nikoliv s Hadamardovou bránou, která je součástí obvodu, s nímž pracujeme, obr. 1. Proto použijeme funkci, která rozloží brány v našem obvodu na brány, které jsou fyzicky realizovatelné na konkrétním kvantovém počítači. Detailní informace, jako jsou např. počty qubitů, aktuální úrovně šumu i kvantové brány, které mají přímou hardwarovou realizaci, jsou uvedené v záložce [Compute Resources](#) na platformě IBM.

```

pm = \
    generate_preset_pass_manager(backend=backend,optimization_level=1)
isa_circuit = pm.run(qc)

```

Dalším krokem je volba počtu spuštění obvodu a samotné spuštění programu.

```

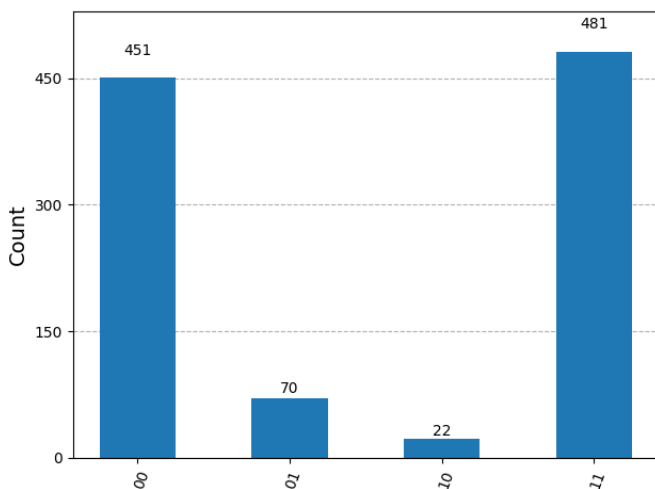
sampler = SamplerV2(mode=backend)
job = sampler.run([isa_circuit],shots=1024)

```

Posledním krokem je získání a vykreslení výsledků.

```
pub_result = job.result()[0]
counts = pub_result.data.meas.get_counts()
plot_histogram(counts)
```

Výsledky z reálného kvantového počítače, obr. 4, jsou negativně ovlivněny šumem, který je v současnosti jedním z největších problémů při práci s kvantovými počítači. Nejen, že stavy $|00\rangle$ a $|11\rangle$ nejsou stejně pravděpodobné, ale dokonce šum způsobil i výskyt stavů $|01\rangle$ nebo $|10\rangle$.



Obr. 4 Výsledky z reálného kvantového počítače.

Další příklady lze najít v bakalářské práci [6] autora tohoto článku, nebo v našich dalších článcích, konkrétně pro molekulu vodíku [9, 10], nebo krystalické materiály [7, 8].

Poděkování

Tento článek vznikl díky finanční podpoře poskytované Akademií věd České republiky, konkrétně prostřednictvím ceny *Premium Academiae* a iniciativě Strategie AV21, zejména programu „AI: Umělá inteligence pro vědu a společnost“, a dále také finanční podpoře poskytované Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky, konkrétně pro-

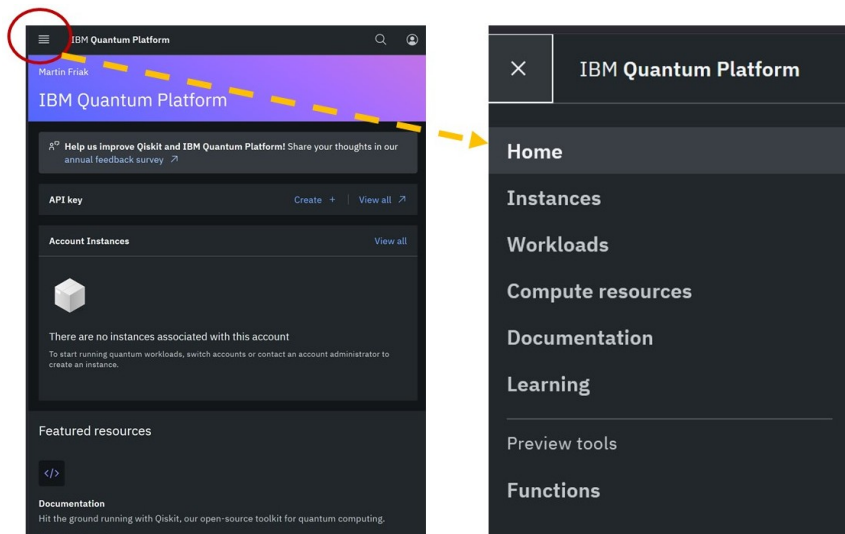
jektu No. LUC25028 v rámci programu INTER-EXCELLENCE II, pod-programu INTER-COST – LUC25. Výpočetní zdroje byly částečně poskytnuty Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky v rámci projektů e-INFRA CZ (ID:90254) v Národním superpočítačovém centru IT4Innovations v Ostravě a e-Infrastruktura CZ (e-INFRA, ID:90254) v rámci MetaCentra a vědeckého cloudu CERIT v Brně a částečně také společností IBM prostřednictvím infrastruktury IBM Quantum Platform a Kvantového inovačního centra (QIC-Czech).

Literatura

- [1] *IBM: Compute Resources*. IBM Quantum Platform, 2025, online, [cit. 2025-05-09], https://quantum.ibm.com/services/resources?system=ibm_brisbane.
- [2] *M. A. Nielsen, I. L. Chuang: Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, 2000.
- [3] *N. Zettili: Quantum Mechanics: Concepts and Applications*. 3 vyd, Wiley, 2022.
- [4] *D. McMahon: Quantum Computing Explained*. Wiley, 2008.
- [5] *Kasirajan Venkateswaran: Fundamentals of Quantum Computing*. Springer, 2021.
- [6] *V. Vašina: Aplikace kvantových počítačů ve výpočetních materiálových vědách*. 2025, online, [cit. 2025-09-29], https://www.vut.cz/studenti/zav-prace/detail/165902?zp_id=165902.
- [7] *I. Miháliková, M. Krejčí, M. Friák: The impact of quantum circuit architecture and hyperparameters on variational quantum algorithms exemplified in the electronic structure of the GaAs crystal*. Scientific Reports, roč. 15 (2025), s. 15746, doi: 10.1038/s41598-025-00151-x.
- [8] *M. Ďuriška, I. Miháliková, M. Friák: Quantum computing of the electronic structure of crystals by the Variational Quantum Deflation algorithm*. Physica Scripta, roč. 100 (2025), s. 045105, doi: 10.1088/1402-4896/adbb29.
- [9] *I. Miháliková, M. Friák, M. Pivoluska, M. Plesch, M. Saip, M. Šob: Best-Practice Aspects of Quantum-Computer Calculations: A Case Study of the Hydrogen Molecule*. Molecules, roč. 27 (2022), s. 597, doi: 10.3390/molecules27030597.
- [10] *I. Miháliková, M. Pivoluska, M. Plesch, M. Friák, D. Nagaj, M. Sob: The Cost of Improving the Precision of the Variational Quantum Eigensolver for Quantum Chemistry*. Nanomaterials, roč. 12 (2022), s. 243, doi: 10.3390/nano12020243.

Dodatek – zřízení účtu na platformě IBM cloud

Před připojením ke kvantovému počítači je nejprve nutné si vytvořit účet na platformě **IBM Cloud**. Při registraci do platformy bude nutné zadat údaje z platební karty které poslouží pouze pro ověření identity a nebudou z ní odečítány peníze. Po zřízení účtu bude možné se přihlásit to platformy určené pro kvantové počítání **IBM Quantum Platform**. Po přihlášení se uživateli zobrazí domovská obrazovka se základní nabídkou.



Obr. 5 Webová stránka IBM Quantum Platform.

Na domovské stránce jsou tyto základní možnosti.

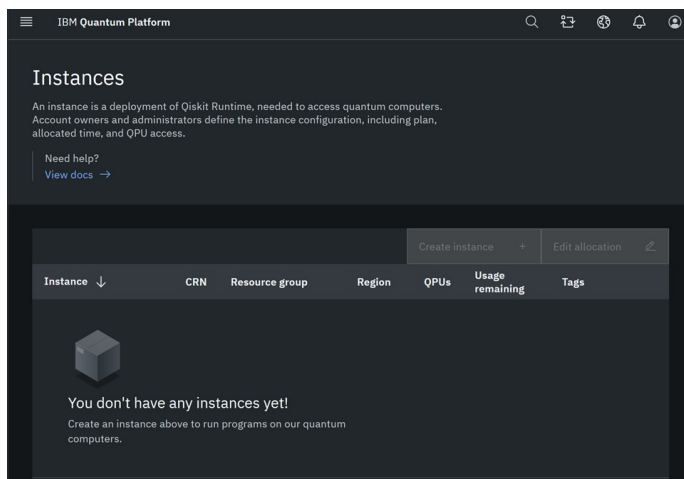
1. Menu s dalšími možnostmi.
2. Vytvořené instance.
3. Možnost vytvoření API klíče pro přístup ke kvantovým počítačům.

Přímo po zřízení účtu je oddíl s vytvořenými instancemi prázdný a je nejprve nutné si instanci vytvořit přes menu s dalšími možnostmi pod číslem 1. na obr. 5.

Z dalších možností na obr. 5 jsou důležité zejména možnosti *Documentation* kde se jedná o kompletní dokumentaci ke knihovně funkcí Qiskit,

kteřá se používá pro programování kvantových počítačů a dále možnost *Learning*, která může začínajícím i pokročilým uživatelům posloužit jako výuková platforma pro další vzdělávání v oblasti kvantových výpočtů.

Nyní je nutné, aby si uživatel zřídil novou instanci kliknutím na *Create new instance* podle obr. 6.



Obr. 6 Obrazovka uživatelského webového rozhraní týkající se tzv. „Instance“.

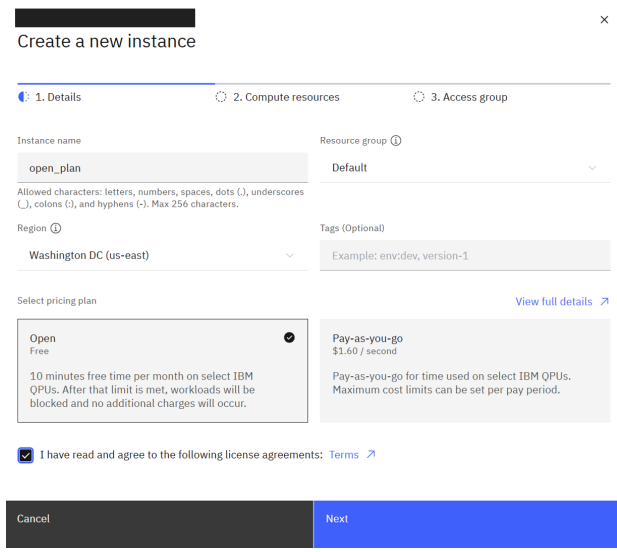
Při zřizování nové instance je při volbě plánů důležité zvolit možnost *Open*, viz obr. 7, která je zdarma, ale výpočetní čas je omezen na 10 minut měsíčně.

Další možností je volba výpočetních zdrojů, viz obr. 8, kterou je nejlepší ponechat v základním nastavení. Uživatel tak bude mít přístup ke všem výpočetním zdrojům, které IBM nabízí pro neplacený *Open* plán.

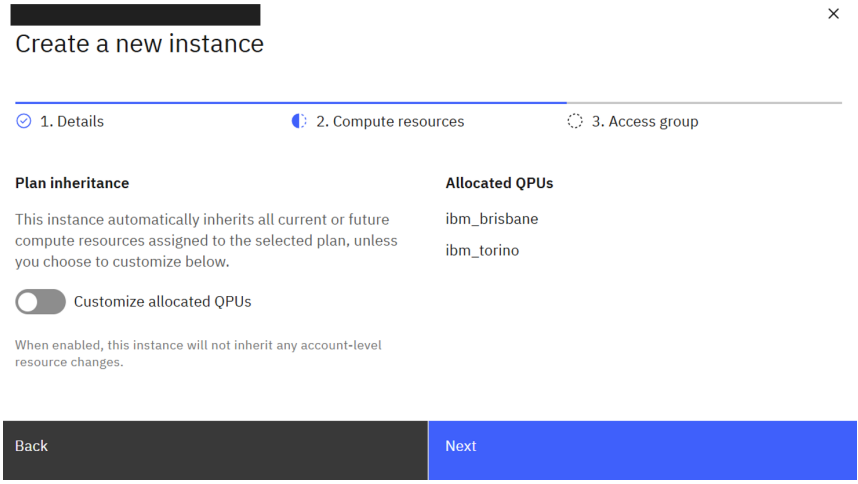
Poslední možností při zřizování instance je možnost vytvoření jedné instance pro více uživatelů, viz obr. 9. Této možnosti doporučuje autor pro výuku nevyužívat, všichni uživatelé by pak sdíleli společný výpočetní čas (omezený na 10 minut měsíčně).

Další nezbytný krok je vytvoření API klíče, který poslouží k identifikaci uživatele. API klíč uživatel vytvoří kliknutím na ikonu *Create API key* v domovském menu dle obr. 10.

Nyní si uživatel pojmenuje a následně vytvoří svůj unikátní API klíč. Pozor, po vytvoření se API klíč zobrazí pouze jednou, v tento moment je důležité si ho uložit na bezpečné místo!



Obr. 7 Obrazovka uživatelského webového rozhraní týkající se vytvoření tzv. „Instance“.



Obr. 8 Obrazovka uživatelského webového rozhraní týkající se volby výpočetních zdrojů při vytvoření tzv. „Instance“. Zde je nejlépe ponechat nastavení v tom původním.

Create a new instance



- 1. Details
- 2. Compute resources
- 3. Access group

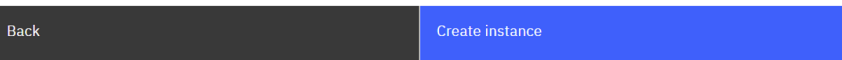
The following access group will be generated for "open_plan":

Users must be added to this access group to run workloads on the instance. You can manage access group members from the users page.

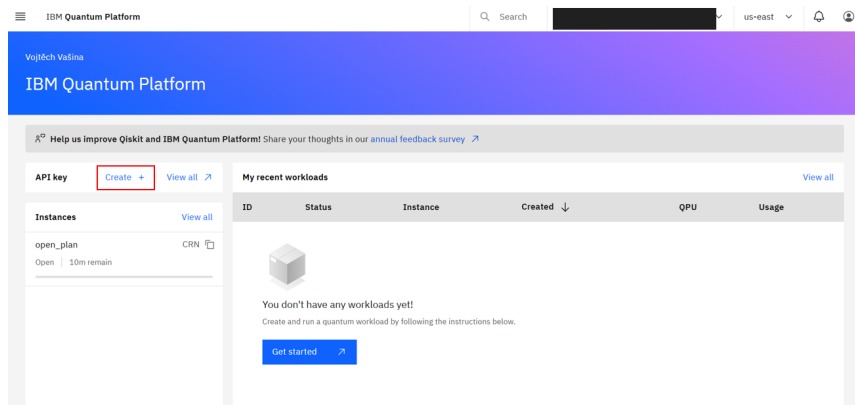
open_plan Collaborators

Collaborators can send workloads to QPUs using the time allocated to this instance.

- Please note: You can manage access groups for this account in [IBM Cloud](#).



Obr. 9 Obrazovka uživatelského webového rozhraní týkající se vytvoření tzv. „Instance“ pro více uživatelů.



Obr. 10 Obrazovka uživatelského webového rozhraní týkající se vytvořeného API klíče.