

Noisy Intermediate-Scale Quantum algorithms

Alba Cervera-Lierta

Semana Ingeniería física

13 de Abril, 2021



UNIVERSITY OF
TORONTO

Outlook

1. Breve historia e introducción a la computación cuántica
2. Noisy Intermediate-Scale Quantum computing
3. Variational Quantum Algorithms
4. Exprimiendo el limón NISQ
5. Aplicaciones
6. Horizonte NISQ

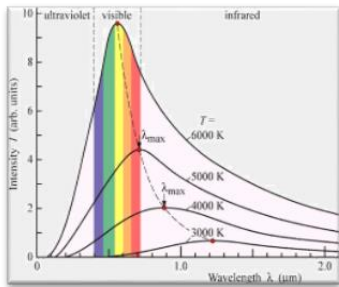
Breve historia de la mecánica cuántica



Quantum 1.0

Quantum 2.0

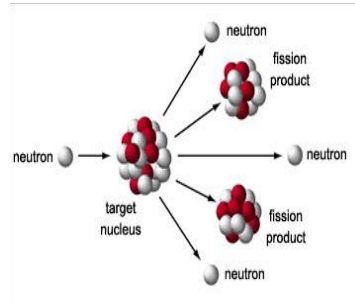
1900-1930



Prenatal

Quantum theory birth (1900)
Postulates (1926)

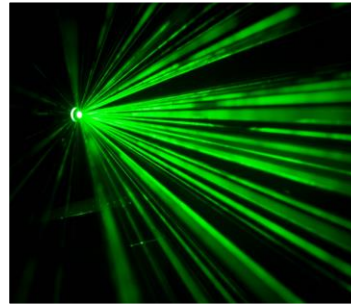
1930-1950



Infancy

First applications:
e.g. nuclear energy,...

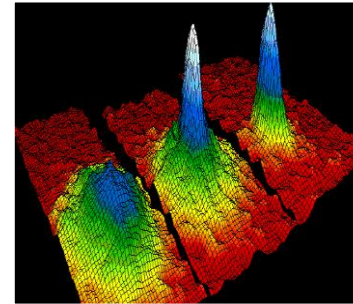
1950-1980



Childhood

Transistor (1947),
Solar Cells (1954),
GPS (1955), Laser (1960), MRI (1971),
...

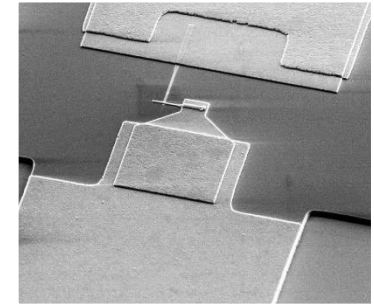
1980-2000



Adolescence

Q Turing Machine,
Quantum simulation (1980),
Shor algorithm (1994), CNOT (1995), Bose-Einstein condensate (1997)

2000-

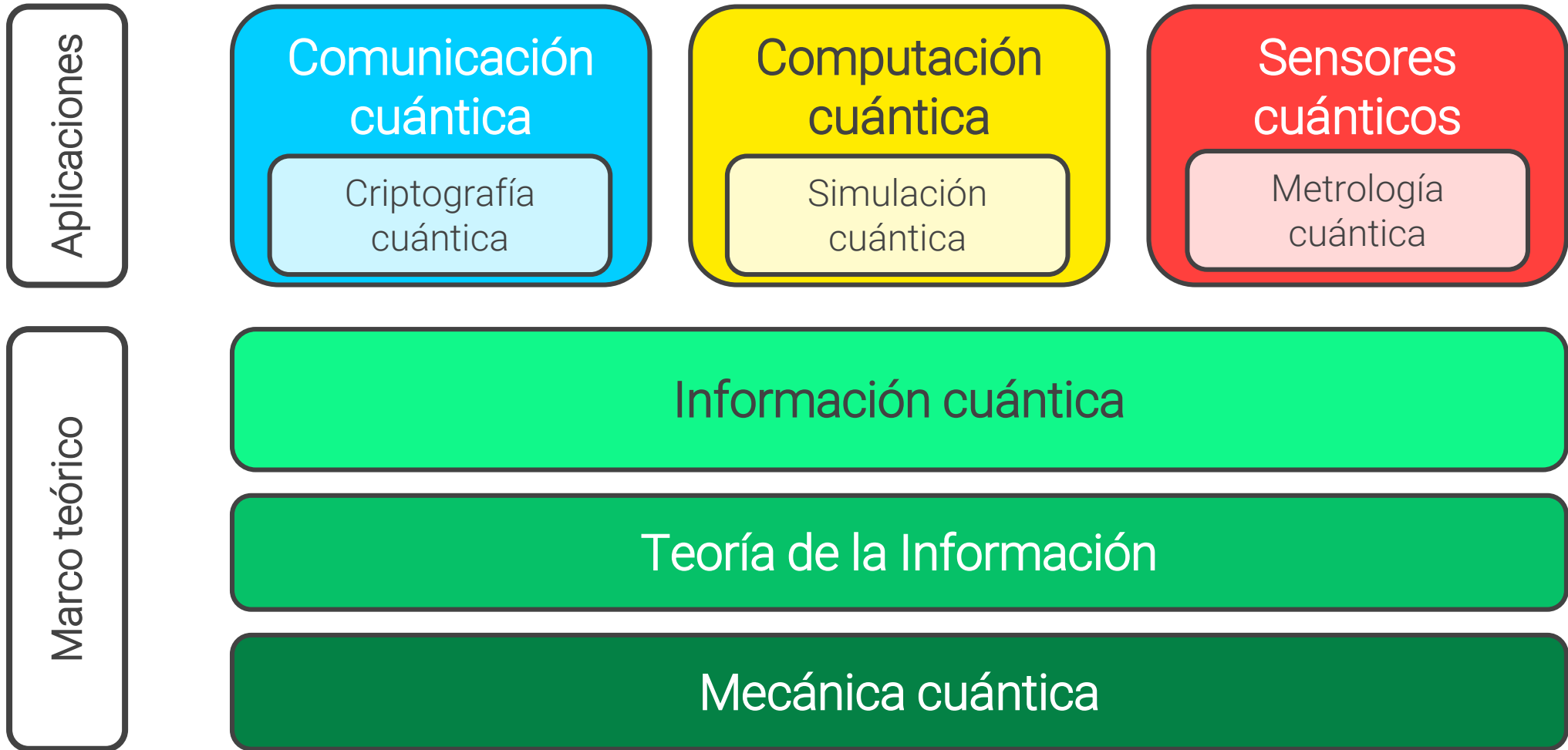


Youth

First Quantum chips (2005),
Quantum teleportation with satellites (2017),
Quantum advantage (2019)

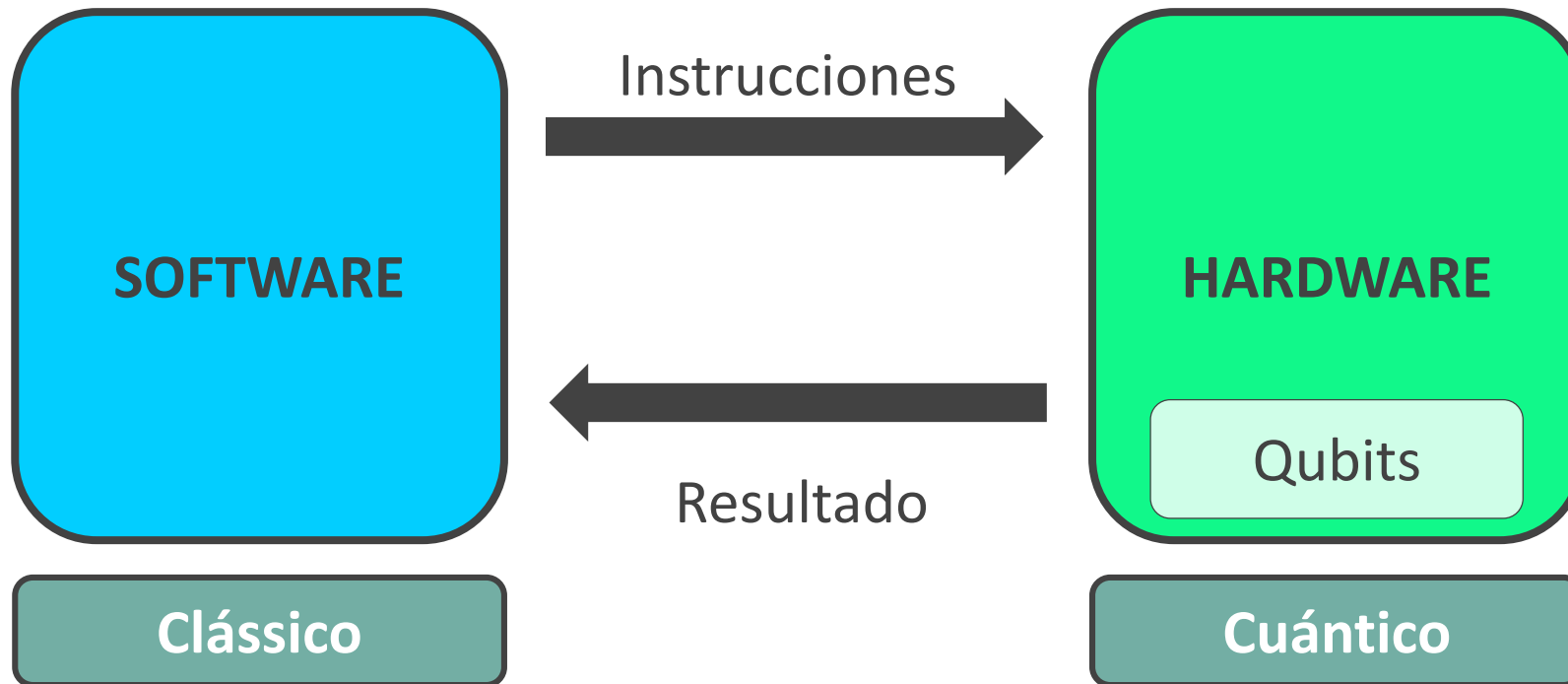


Quantum 2.0



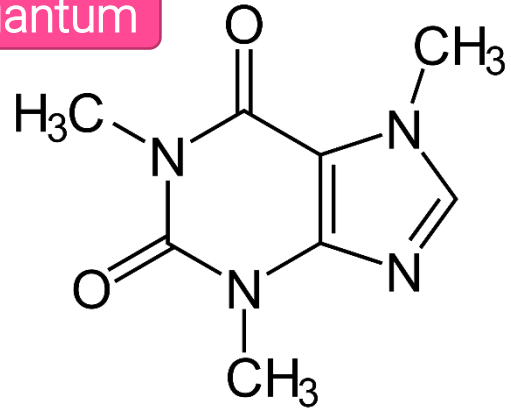
¿Qué es un ordenador cuántico?

Un dispositivo capaz de procesar datos de forma mecánico-cuántica.
Un dispositivo que utiliza las propiedades de la mecánica cuántica para procesar los datos.

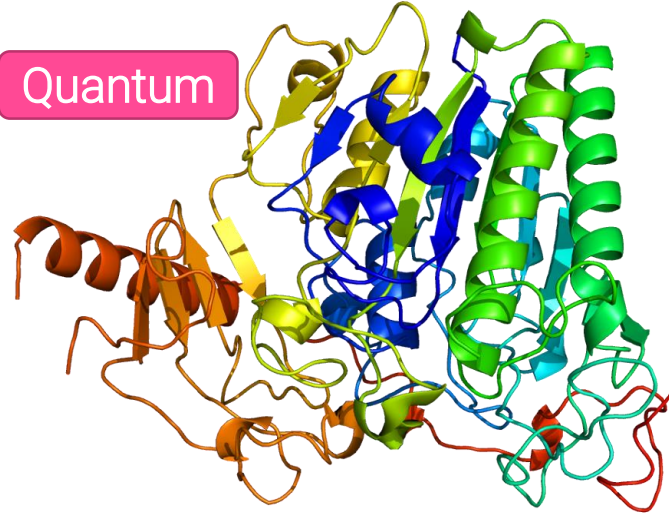


¿Por qué necesitamos un ordenador cuántico?

Quantum



Quantum



Not Quantum



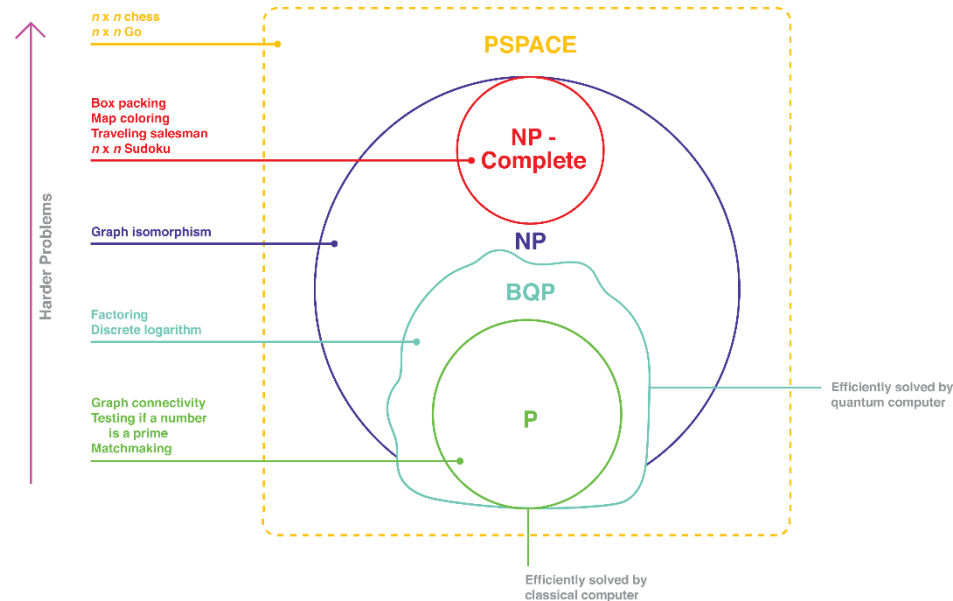
Quantum



Powerful, but Not Quantum

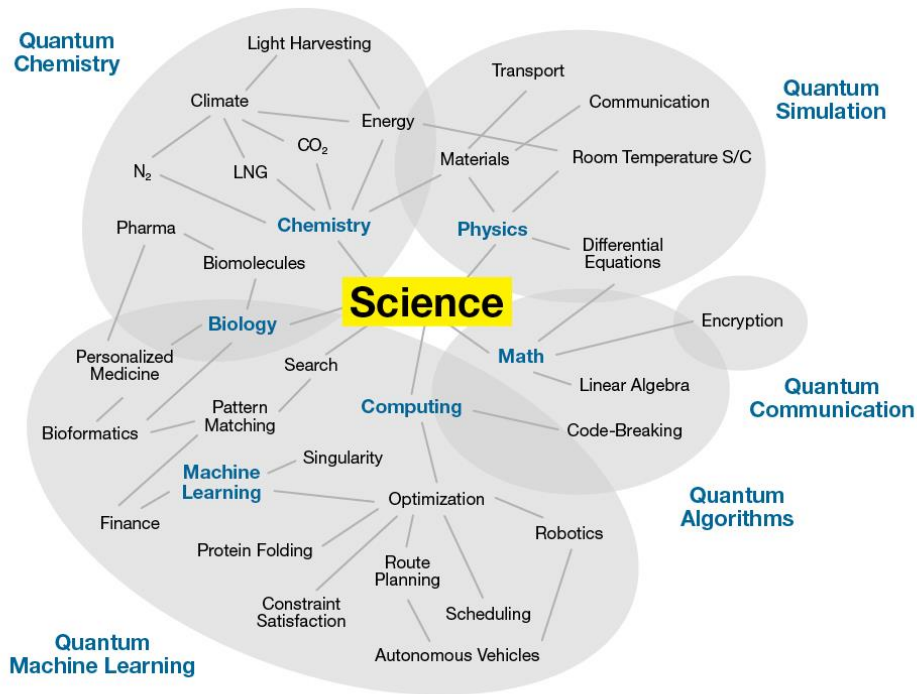


MareNostrum supercomputer (BSC)



¿Por qué necesitamos un ordenador cuántico?

Quantum Computing Use Cases



I therefore believe it's true that with a suitable class of quantum machines you could imitate any quantum system, including the physical world.

—Richard P. Feynman,
“Simulating physics with computers”, 1982.

gartner.com/SmarterWithGartner

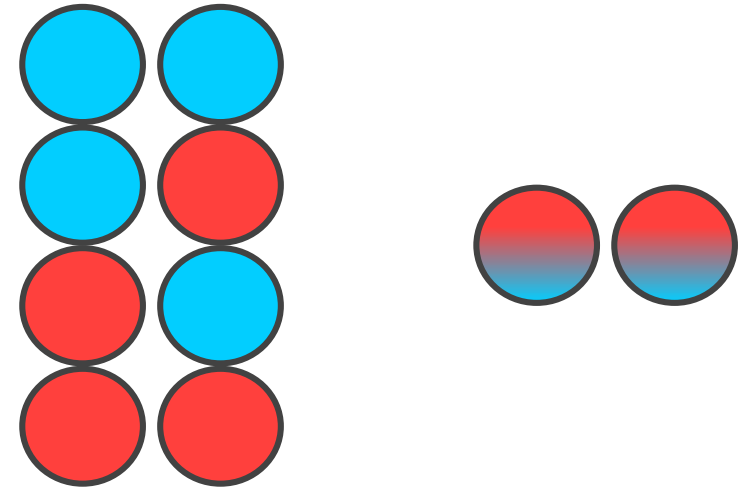
Source: Adapted from Pete Shadbolt and Jeremy O'Brien
© 2017 Gartner, Inc. and/or its affiliates. All rights reserved. Gartner is a registered trademark of Gartner, Inc. or its affiliates. PR_338248

Gartner

¿Cómo funciona?

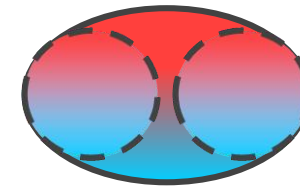


$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$



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

Entrelazamiento

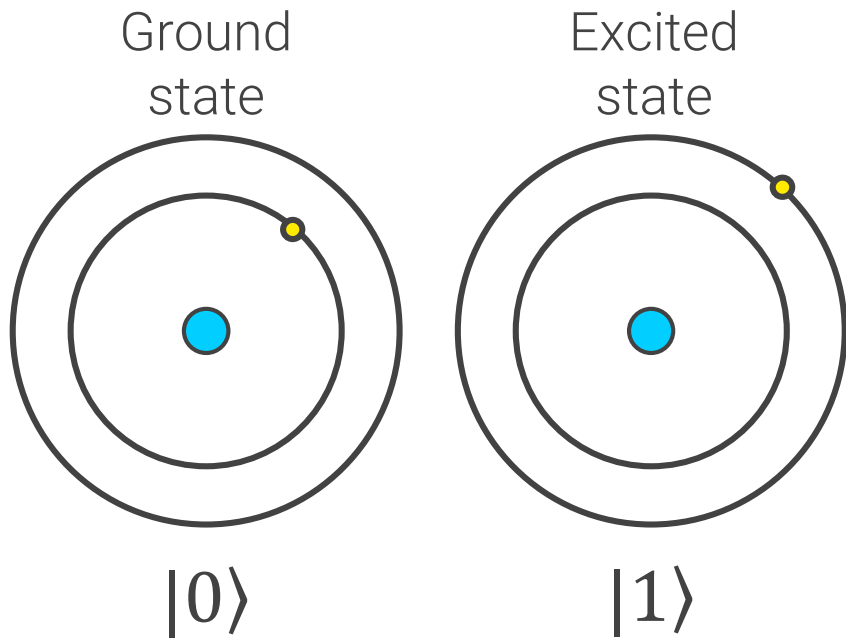


$$|\psi\rangle \neq |\psi\rangle_1 \otimes |\psi\rangle_2$$

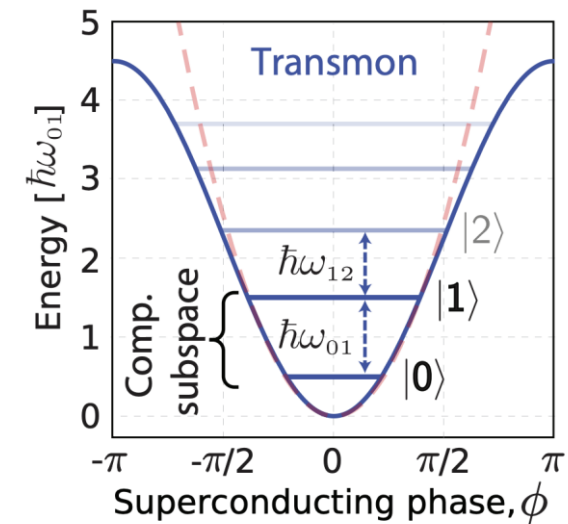
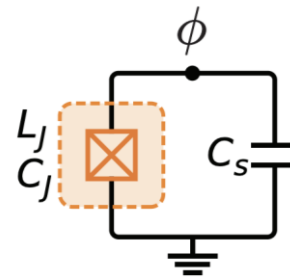
¿Cómo funciona?

Qubit: sistema físico que 1) es cuántico y 2) tiene dos estados cuánticos bien definidos

Ejemplo: orbitales atómicos

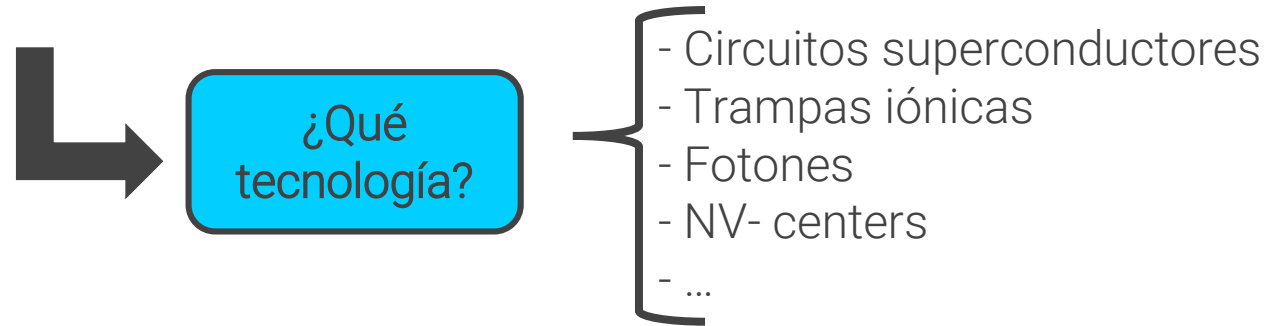


Ejemplo: superconducting circuit
(transmon qubit)

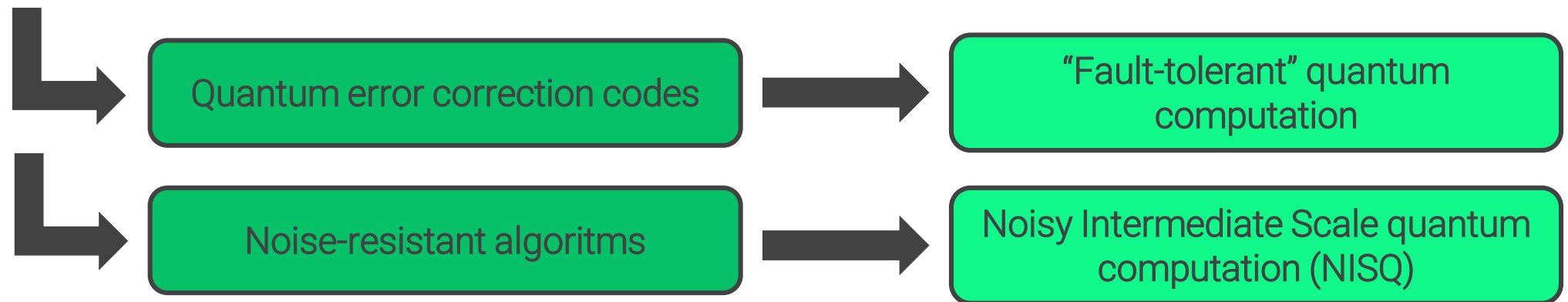


Desafíos experimentales

- Escalabilidad: cómo diseñar y construir ordenadores cuánticos de miles de qubits.



- Los qubits no son perfectos, son “ruidosos” (noisy)



Computación cuántica en la era NISQ

Quantum Computing in the NISQ era and beyond

John Preskill

Quantum 2, 79 (2018)

Noisy intermediate-scale quantum (NISQ) algorithms

Kishor Bharti,^{1, *} Alba Cervera-Lierta,^{2, 3, *} Thi Ha Kyaw,^{2, 3, *} Tobias Haug,⁴ Sumner Alperin-Lea,³ Abhinav Anand,³ Matthias Degroote,^{2, 3, 5} Hermanni Heimonen,¹ Jakob S. Kottmann,^{2, 3} Tim Menke,^{6, 7, 8} Wai-Keong Mok,¹ Sukin Sim,⁹ Leong-Chuan Kwek,^{1, 10, 11, †} and Alán Aspuru-Guzik^{2, 3, 12, 13, ‡}

arXiv:2101.08448

Noisy Intermediate-Scale Quantum



¿Por qué la computación cuántica es tan difícil experimentalmente?

- Los qubits tienen que interactuar entre ellos (puertas lógicas cuánticas)...
- ...pero no con su entorno...
- ...excepto si los queremos medir.

¿Cuál es el “state-of-the-art” en computación cuántica digital?

- ~50 qubit devices
- Error rates of $\sim 10^{-3}$
- No Quantum Error Correction (QEC)

Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ) computing

- 50-100 qubits
- Low error rates
- No QEC

¿Qué podemos hacer en NISQ?

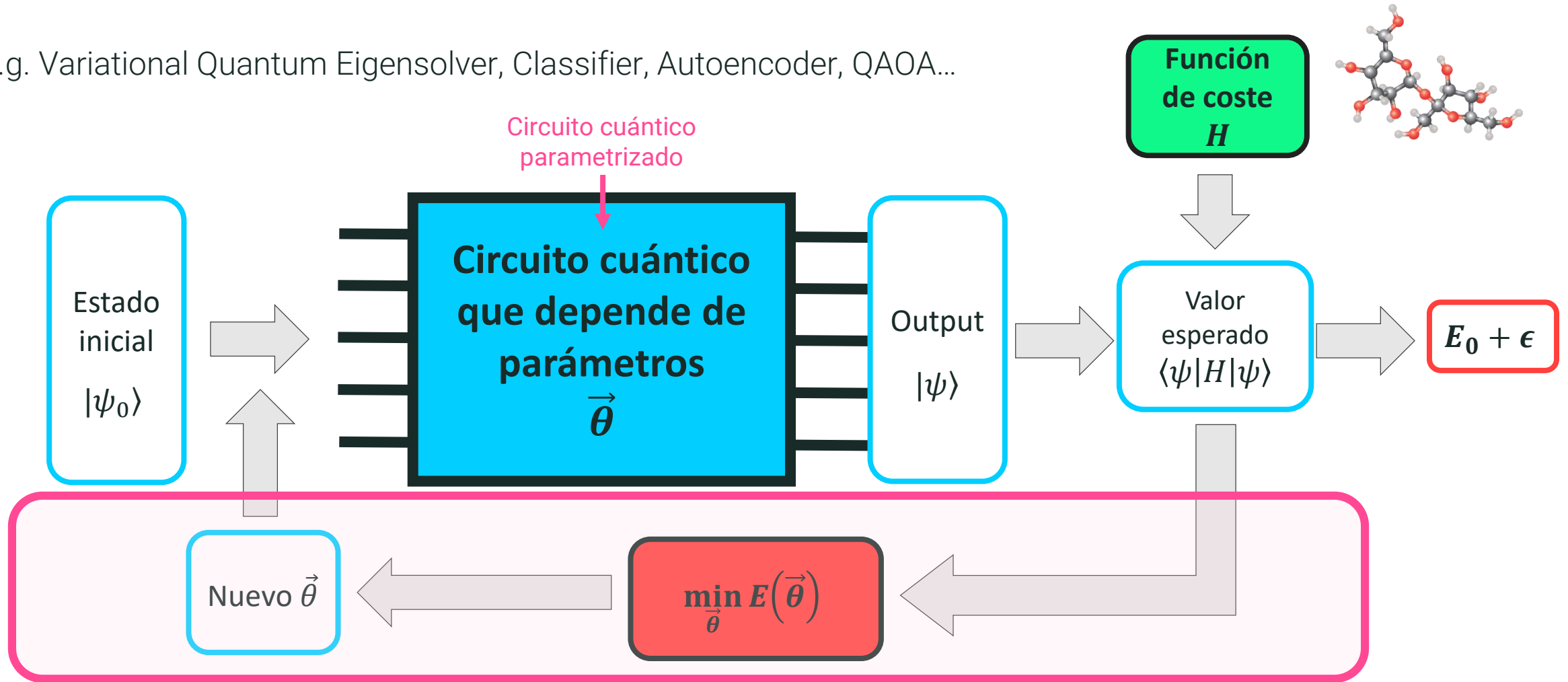
- Buen campo de pruebas
- ¿Posibles aplicaciones?
- Un paso más hacia la Fault Tolerant QC

Variational Quantum Algorithms

III. Other NISQ approaches	19
A. Quantum annealing	19
B. Gaussian boson sampling	21
1. The protocol	21
2. Applications	22
C. Analog quantum simulation	22
1. Implementations	23
2. Programmable quantum simulators	23
D. Digital-analog quantum simulation and computation	23
E. Iterative quantum assisted eigensolver	24

Variational Quantum Algorithms

e.g. Variational Quantum Eigensolver, Classifier, Autoencoder, QAOA...



Optimización clásica

Principio variacional: $E = \langle\psi|H|\psi\rangle \geq E_0$

Función de coste



Codifica el problema en la forma de un operador cuántico, e.g. un Hamiltoniano

$$\langle H \rangle_{\mathcal{U}(\theta)} \equiv \langle 0 | \mathcal{U}^\dagger(\theta) H \mathcal{U}(\theta) | 0 \rangle$$

La función de coste se descompone en “Pauli strings”, operadores que se pueden medir fácilmente en nuestro ordenador cuántico.

$$H = \sum_{k=1}^M c_k \hat{P}_k \longrightarrow \langle H \rangle_{\mathcal{U}} = \sum_{k=1}^M c_k \langle \hat{P}_k \rangle_{\mathcal{U}}$$

Parameterized quantum circuits

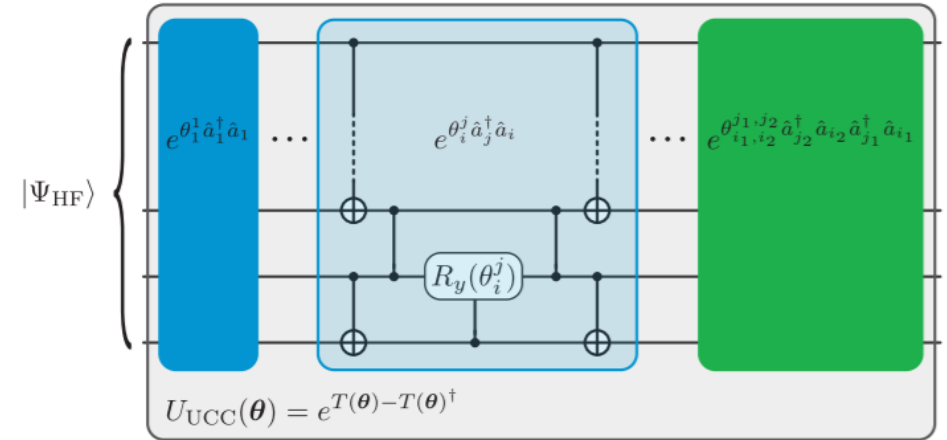


Prepara lo que será una aproximación del ground state de nuestra función de coste.

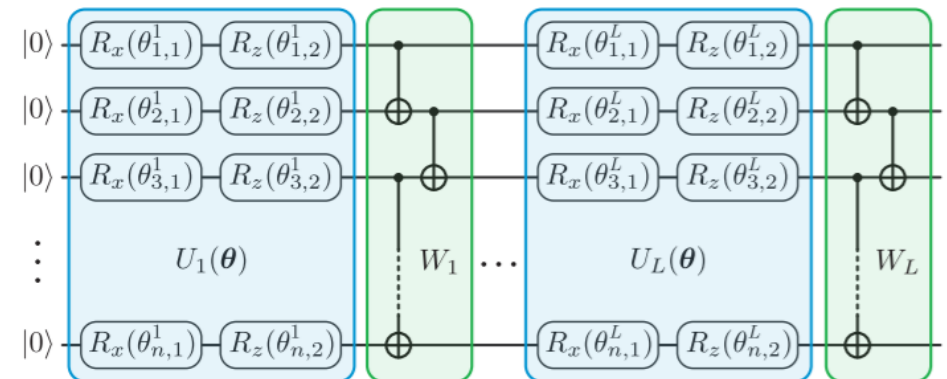
Depende de una serie de parámetros a optimizar para minimizar la función de coste.

Se pueden diseñar desde un punto de vista físico (e.g. UCC, QAOA,...) o desde un punto de vista práctico (utilizando un set de puertas limitado y una cierta conectividad entre los qubits).

a Problem-inspired ansatz



b Hardware-efficient ansatz



Optimización clásica



Necesitamos navegar por el espacio de parámetros de nuestro circuito cuántico, e.g. utilizando métodos basados en el gradiente.

$$\theta_i^{(t+1)} = \theta_i^{(t)} - \eta \partial_i f(\boldsymbol{\theta})$$

Los gradientes son los valores esperados de las derivadas de nuestro circuito cuántico respecto a uno de los parámetros.

Ejemplo: parameter-shift rule

$$\mathcal{U}(\boldsymbol{\theta}) = V(\boldsymbol{\theta}_{-i})G(\theta_i)W(\boldsymbol{\theta}_{-i}) \quad G = e^{-i\theta_i g}$$

Eigenvalues of g are $\pm\lambda$

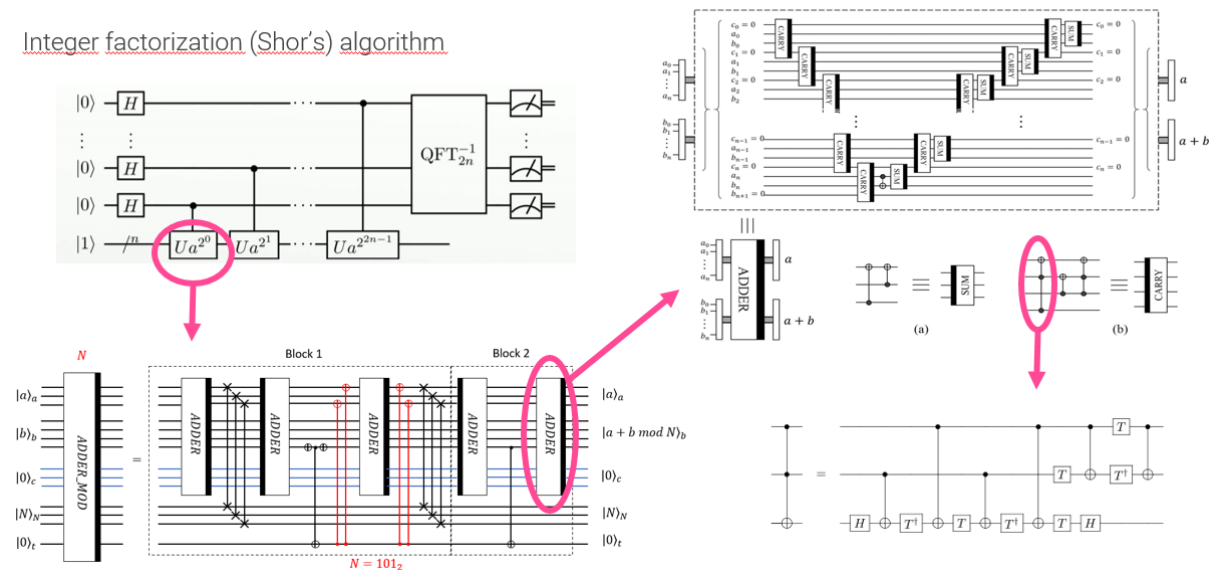
$$\partial_i \langle f(\boldsymbol{\theta}) \rangle = \lambda (\langle f(\boldsymbol{\theta}_+) \rangle - \langle f(\boldsymbol{\theta}_-) \rangle) \quad \boldsymbol{\theta}_{\pm} = \boldsymbol{\theta} \pm (\pi/4\lambda) \mathbf{e}_i$$

Gradient-free: genetic algorithms, reinforcement learning, ...

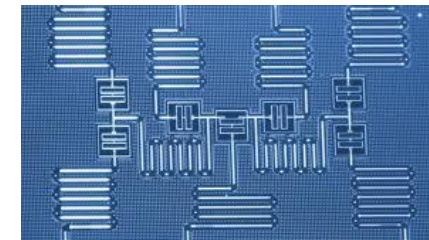


Exprimiendo el limón NISQ

Integer factorization (Shor's) algorithm



My perfect quantum algorithm



Quantum Error Mitigation

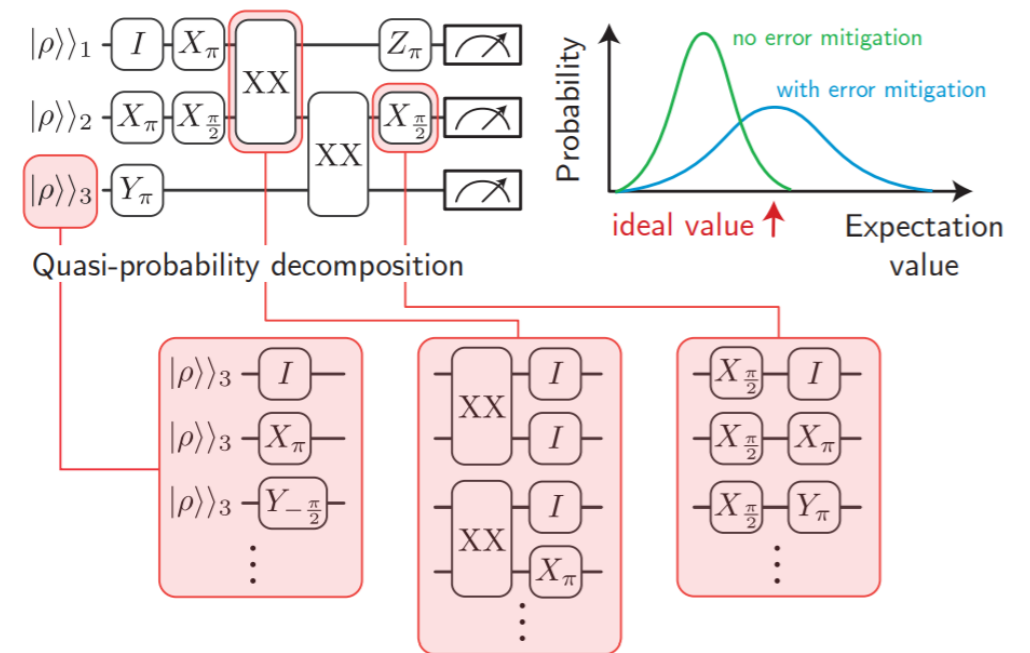
Conjunto de técnicas clásicas de post-procesamiento y operaciones activas en el hardware que nos permiten corregir o compensar los errores que del ordenador cuántico.

Zero-noise extrapolation

Stabilizer based approach

Quantum Optimal Control: Dynamical Decoupling, ...

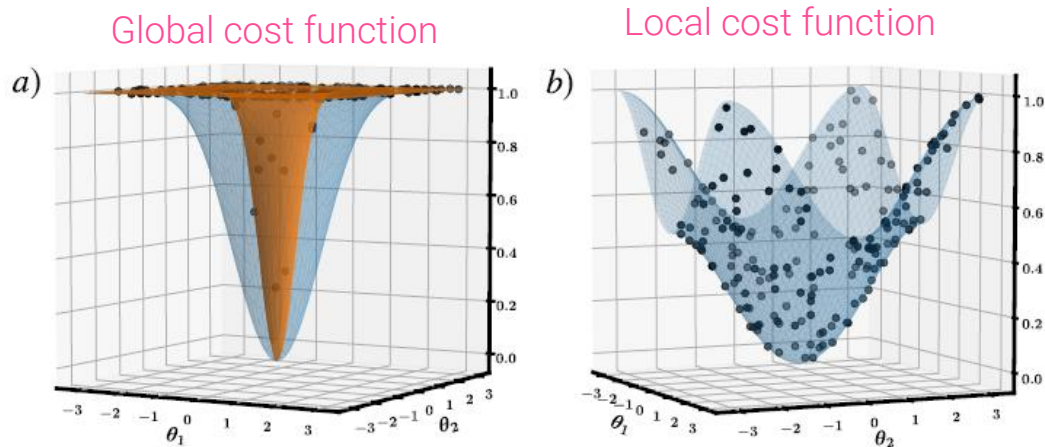
Probabilistic error cancellation



The *barren-plateaux* problem

Calculamos los gradientes del circuito cuántico y usamos esos valores para minimizar clásicamente la función de coste.

Sin ninguna pista más, los parámetros $\vec{\theta}$ se inicializan con valores aleatorios.



Consecuencia: *barren-plateaux*

El valor esperado de los gradients es cero!
El valor esperado de la varianza tiende a cero exponencialmente!

Soluciones

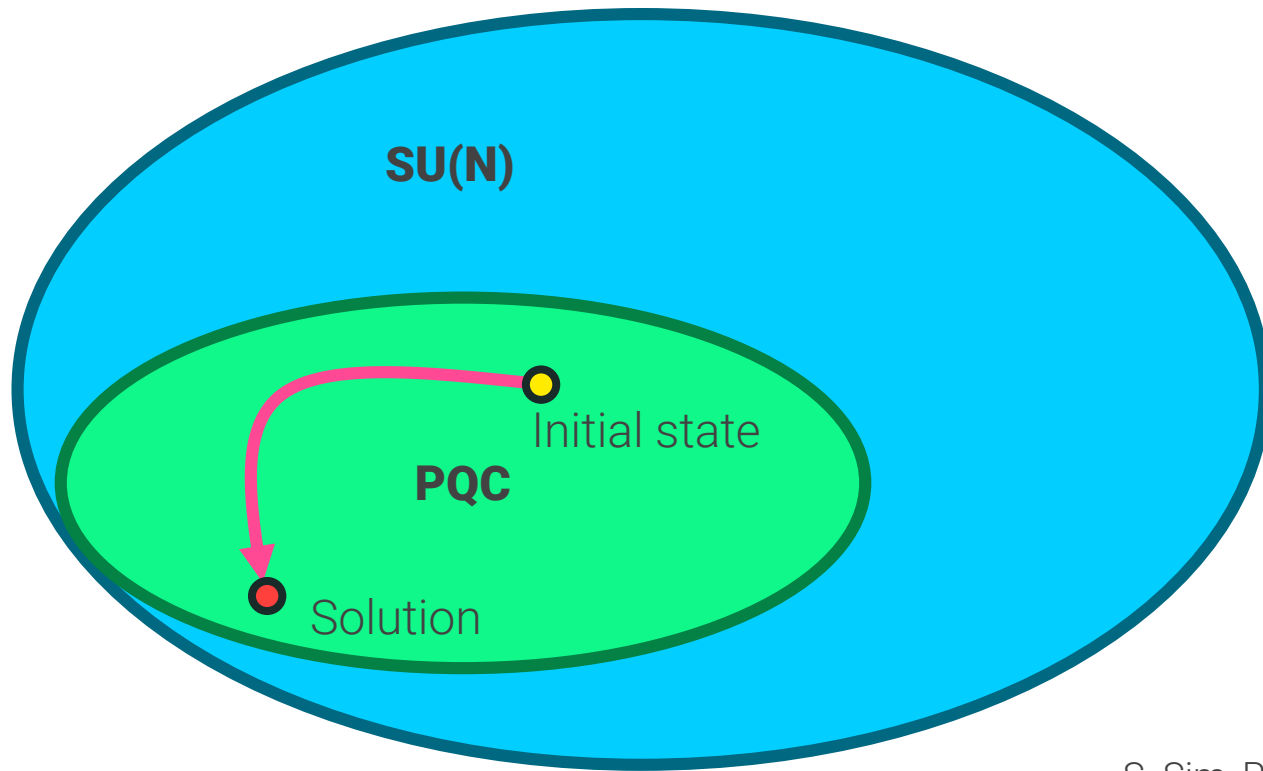
- Escojer los parametros cerca de la solución.
- Usar funciones de coste locales en lugar de globales.
- Introducir correlaciones entre los parámetros.

Ref.: M. Cerezo et. al. Nature Communications 12, 1791 (2021).

• McClean, J.R., Boixo, S., Smelyanskiy, V.N. et al. Nat Commun 9, 4812 (2018)

Expresibilidad

Al diseñar el PQC, tenemos que tener cuidado de no quedarnos estancados en una región pequeña del espacio de Hilbert. Nuestro PQC tiene que ser capaz de explorar el espacio o hallar el camino hacia la solución o una buena aproximación de ésta.

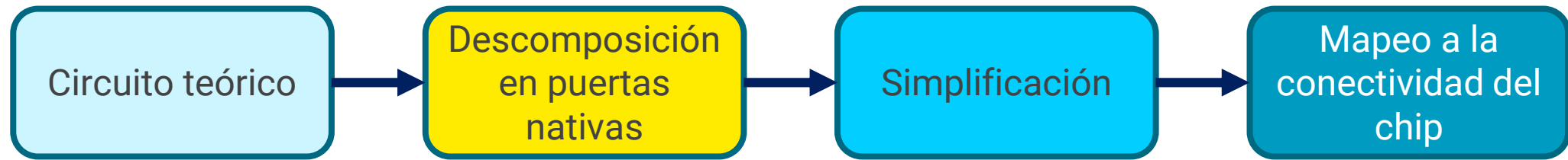


Podemos cuantificar la “expresibilidad” del PQC calculando la distancia entre los estados Haar-distribuidos (aleatorios) y la distribución de estados generados por nuestro PQC.

$$A_U^{(t)} = \left\| \int_{\text{Haar}} (|\psi\rangle\langle\psi|)^{\otimes t} d\psi - \int_{\theta} (|\psi_{\theta}\rangle\langle\psi_{\theta}|)^{\otimes t} d\psi_{\theta} \right\|$$

S. Sim, P. D. Johnson, A. Aspuru-Guzik, Adv. Quantum Technol. 2 1900070 (2019)

Compilación del circuito



Puertas Universales y Nativas

Teorema de Solovay-Kitaev: con un set de puertas universal se puede aproximar con precisión ϵ cualquier operación $SU(N)$ con un circuito con un número polinómico de puertas.

Teorema de Gottesman-Knill: los circuitos compuestos por puertas pertenecientes a un grupo de Clifford (circuitos Clifford) se pueden simular de forma eficiente con un ordenador clásico.

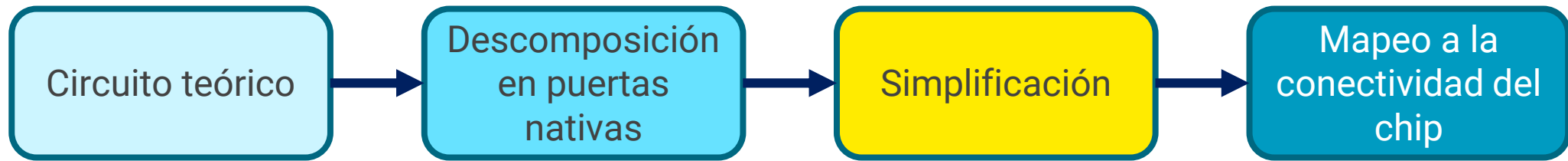
Los sets de puertas se componen normalmente de puertas Clifford + una puerta no-Clifford, e.g. $\{H, S, CNOT\} + T$

Sin embargo, dependiendo del hardware (el chip cuántico), algunas puertas son más fáciles de implementar y controlar, e.g. CZ para los circuitos superconductores, XX para los iones atrapados,...

A más puertas nativas tengamos, más corto y mejor será nuestro circuito.



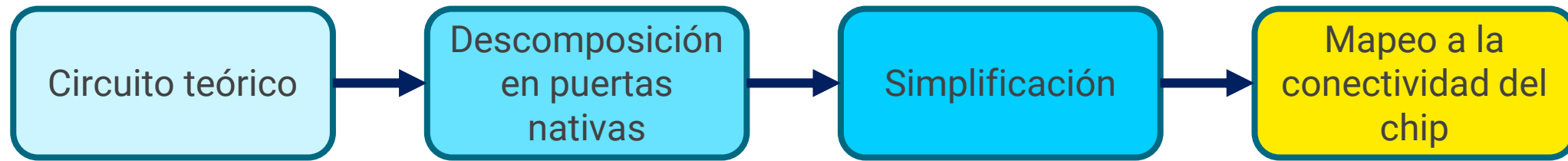
Circuit compilation



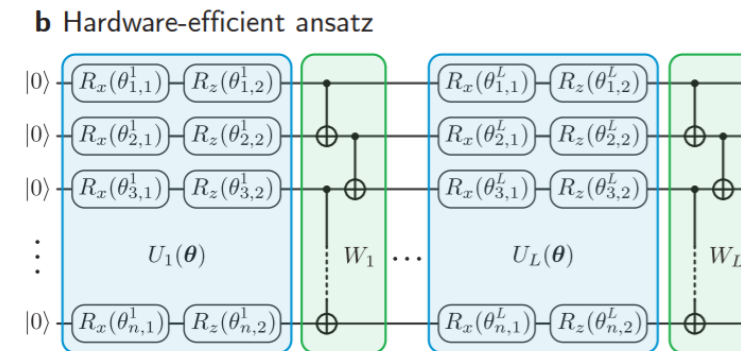
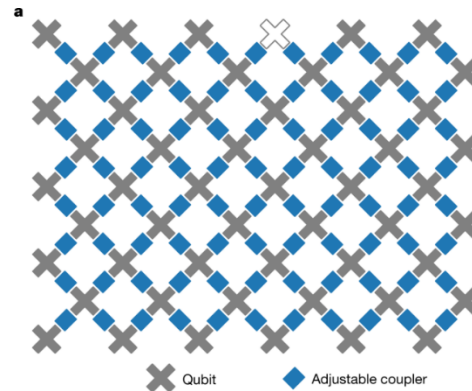
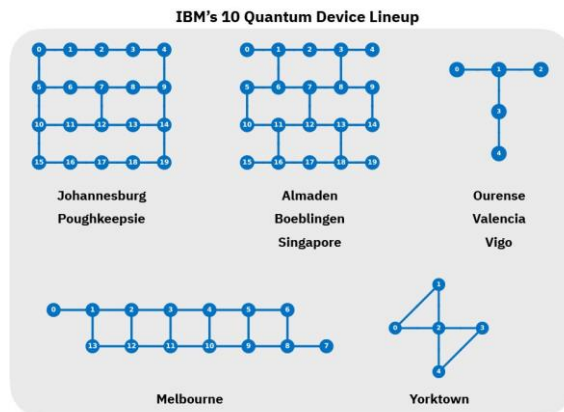
Simplificación del circuito: podemos utilizar identidades o herramiendos como el cálculo ZX (representación de circuitos mediante grafos).

“Interacting quantum observables: categorical algebra and diagrammatics”,
B. Coecke, R. Duncan, NJP 13 (4): 043016 (2011).

Circuit compilation



El problema del mapeo al chip real: no todos los qubits están físicamente conectados, de modo que tenemos que mapear nuestro circuito a la conectividad del chip.

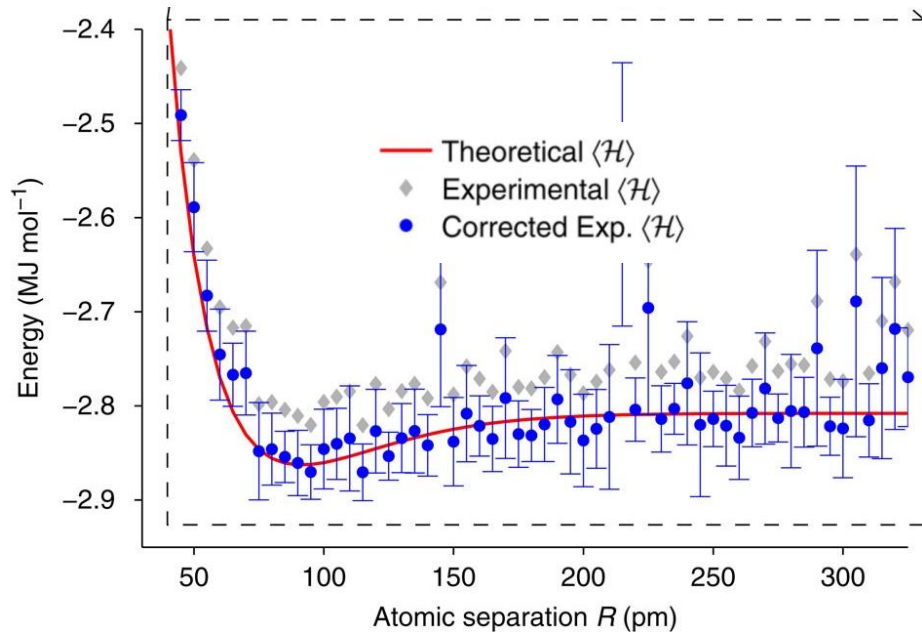


Aplicaciones

A. Many-body physics and chemistry	35	C. Combinatorial optimization	50
1. Qubit encodings	35	1. Max-Cut	50
2. Constructing electronic Hamiltonians	36	2. Other combinatorial optimization problems	52
3. Variational quantum eigensolver	37	D. Numerical solvers	52
4. Variational quantum eigensolver for excited states	38	1. Variational quantum factoring	52
5. Hamiltonian simulation	40	2. Singular value decomposition	53
6. Quantum information scrambling and thermalization	41	3. Linear system problem	53
7. Simulating open quantum systems	41	4. Non-linear differential equations	54
8. Nonequilibrium steady state	42	E. Finance	54
9. Gibbs state preparation	43	1. Portfolio optimization	55
10. Many-body ground state preparation	43	2. Fraud detection	56
11. Quantum autoencoder	44	F. Other applications	56
12. Quantum computer-aided design	44	1. Quantum foundations	56
B. Machine learning	45	2. Quantum optimal control	56
1. Supervised learning	46	3. Quantum metrology	57
2. Unsupervised learning	48	4. Fidelity estimation	57
3. Reinforcement learning	49	5. Quantum error correction	57
		6. Nuclear physics	57
		7. Entanglement properties	58

Química: Variational Quantum Eigensolver

Bond dissociation curve of the He–H⁺ molecule.



OBJETIVO: encontrar $|\psi\rangle$ que minimice

$$\frac{\langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

El Hamiltoniano que describe la estructura electrónica de la molécula se puede descomponer en Pauli strings

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \sum_{i\alpha} h_{\alpha}^i \langle \sigma_{\alpha}^i \rangle + \sum_{ij\alpha\beta} h_{\alpha\beta}^{ij} \langle \sigma_{\alpha}^i \sigma_{\beta}^j \rangle + \dots$$

Unitary Couple-Cluster ansatz: genera el circuito cuántico para preparar el ground state del Hamiltoniano

$$|\Psi(\theta)\rangle = e^{T(\theta)-T(\theta)^{\dagger}} |\Psi_{\text{HF}}\rangle$$

Unitary operation (Cluster operator) $T(\theta)$ Hartree-Fock $|\Psi_{\text{HF}}\rangle$ Excitations Hartree-Fock orbitals

$$T(\theta) = T_1(\theta) + T_2(\theta) + \dots$$

$$T_1(\theta) = \sum_{\substack{i \in \text{occ} \\ j \in \text{virt}}} \theta_i^j \hat{a}_j^{\dagger} \hat{a}_i$$

$$T_2(\theta) = \sum_{\substack{i_1, i_2 \in \text{occ} \\ j_1, j_2 \in \text{virt}}} \theta_{i_1, i_2}^{j_1, j_2} \hat{a}_{j_2}^{\dagger} \hat{a}_{i_2} \hat{a}_{j_1}^{\dagger} \hat{a}_{i_1}$$

Transform the fermionic operators to Pauli strings (e.g. Jordan Wigner) and they become the generators of the quantum gates.

Quantum Approximate Optimization Algorithm



Se puede describir como una aproximación de la descomposición de Trotter de la evolución adiabática.

Mixing Hamiltonian

$$H_M \equiv \sum_{i=1}^n \hat{\sigma}_x^i$$

Problem Hamiltonian

$$H_P \equiv \sum_{i=1}^n C(e_i) |e_i\rangle$$

Combinatorial optimization problem
encoded in Pauli strings

$$C_\alpha(z) = \begin{cases} 1 & \text{if } z \text{ satisfies } C_\alpha(z) \\ 0 & \text{if } z \text{ does not satisfy} \end{cases}$$

$$H_P = \sum_{(i,j) \in E} \frac{1}{2} (I - \hat{\sigma}_z^i \otimes \hat{\sigma}_z^j) \equiv \sum_{(i,j) \in E} C_{ij}$$

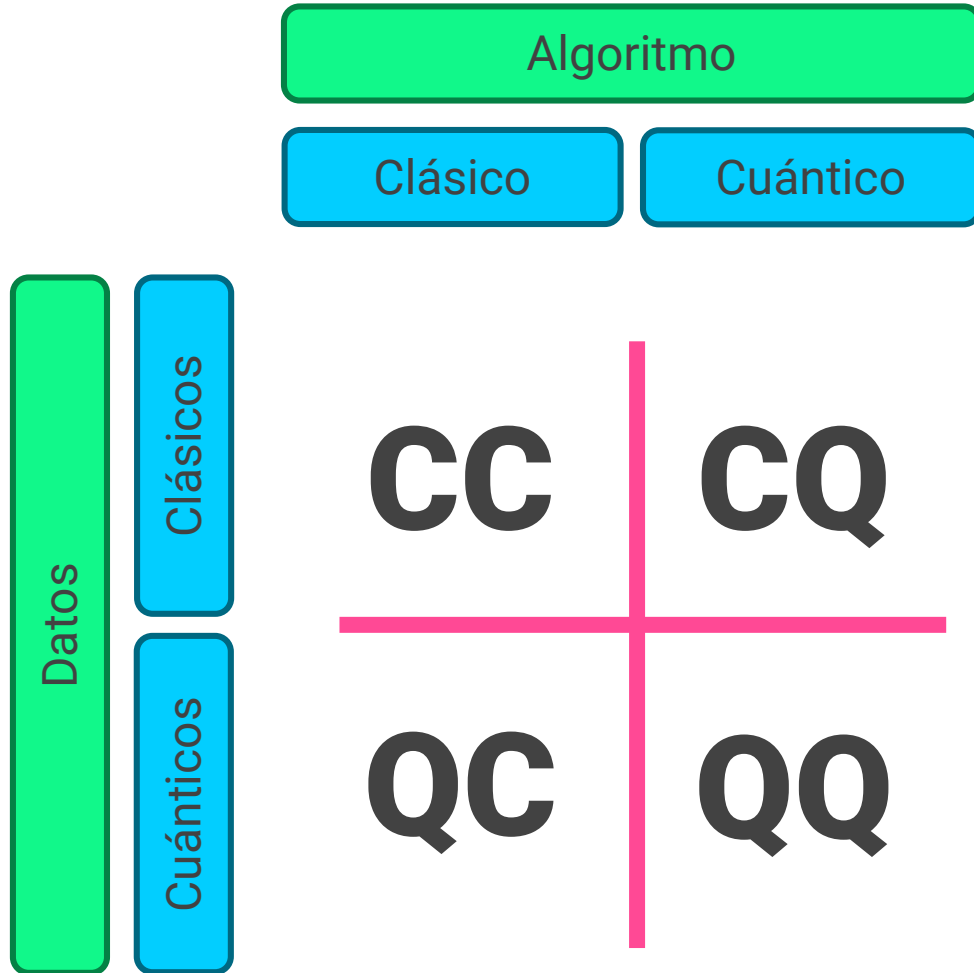
Construimos el ansatz del circuito alternando el Hamiltoniano problema y “mixing”, donde β y γ son los parametros a optimizar clásicamente.

$$|\Psi(\gamma, \beta)\rangle \equiv e^{-i\beta_p H_M} e^{-i\gamma_p H_P} \dots e^{-i\beta_1 H_M} e^{-i\gamma_1 H_P} |D\rangle$$

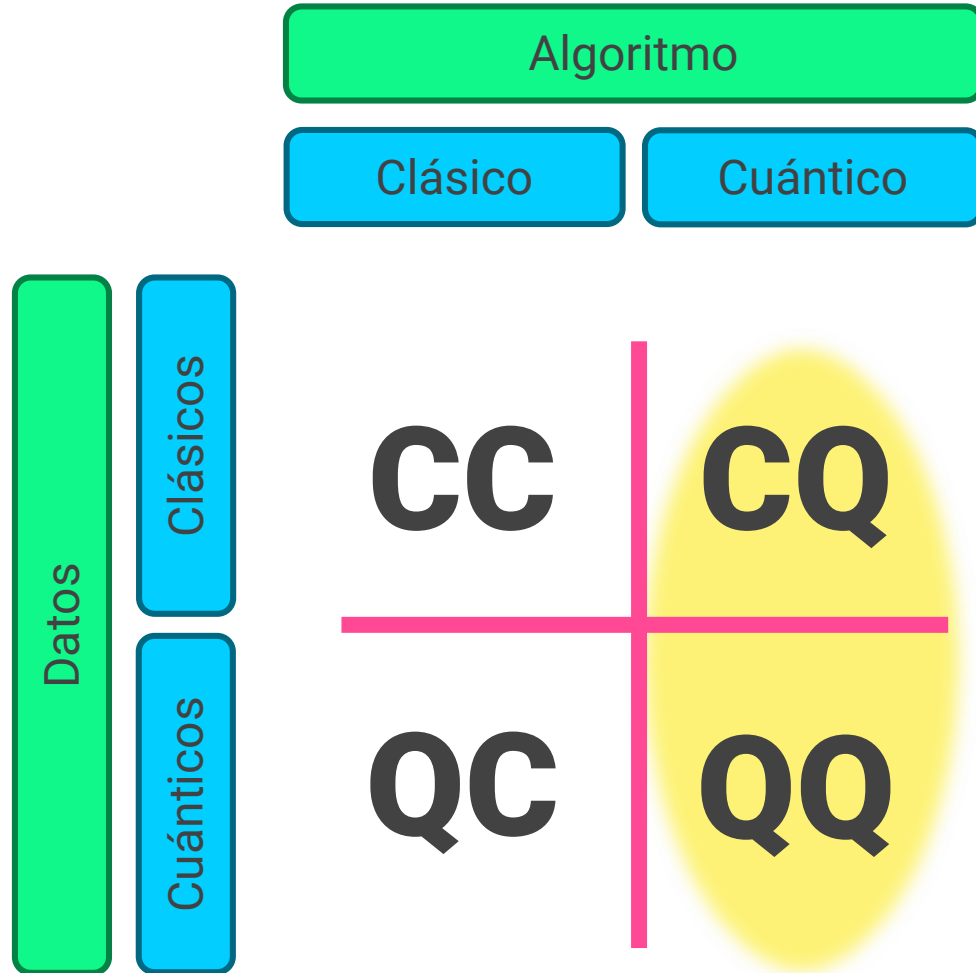
full superposition state

Objective function: $\langle \Psi(\gamma, \beta) | H_P(\gamma, \beta) | \Psi(\gamma, \beta) \rangle$

Machine Learning



Machine Learning



Quantum Machine Learning

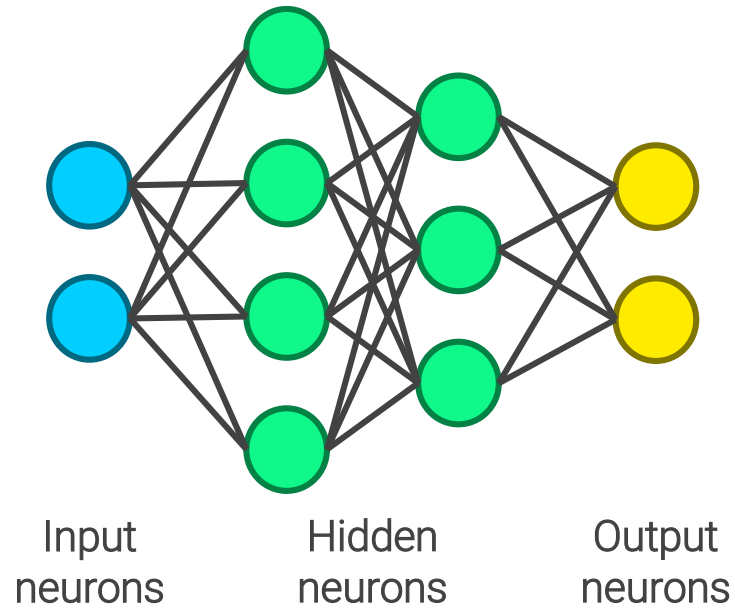
Algoritmos cuánticos que procesan datos clásicos o cuánticos

- Supervised Learning
- Unsupervised Learning
- Reinforcement Learning

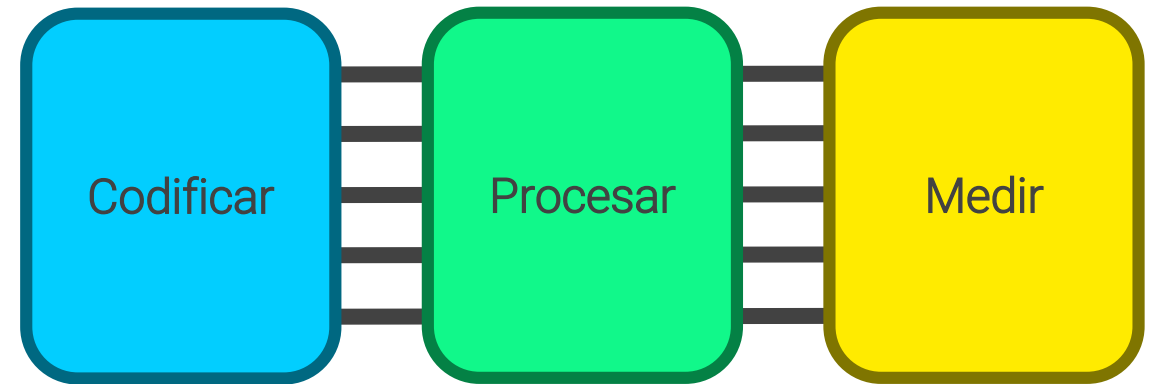
De redes neuronales clásicas a cuánticas



Clásicas



Cuánticas
(circuit centric)



K Mitarai, M Negoro, M Kitagawa, K Fujii Phys. Revs A 98 (3), 032309 (2018)

E. Farhi and H. Neven, arXiv:1802.06002 (2018)

M. Schuld and N. Killoran, Phys. Rev. Lett. 122, 040504 (2019)

M. Schuld, A. Bocharov, K. M. Svore, and N. Wiebe, Phys. Rev. A 101, 032308 (2020)

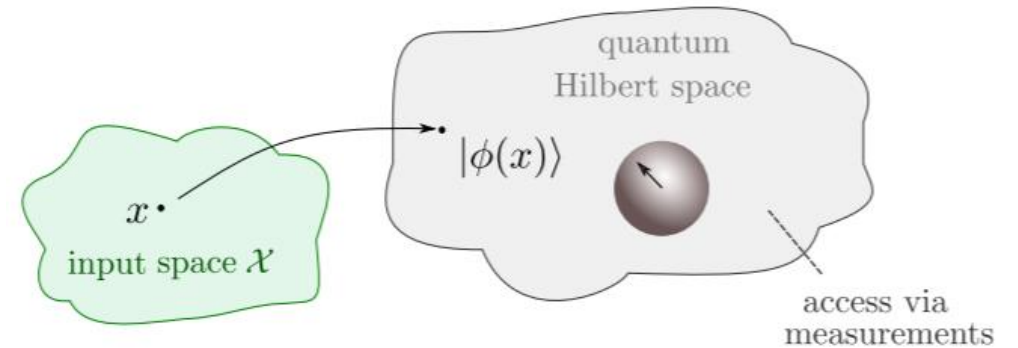
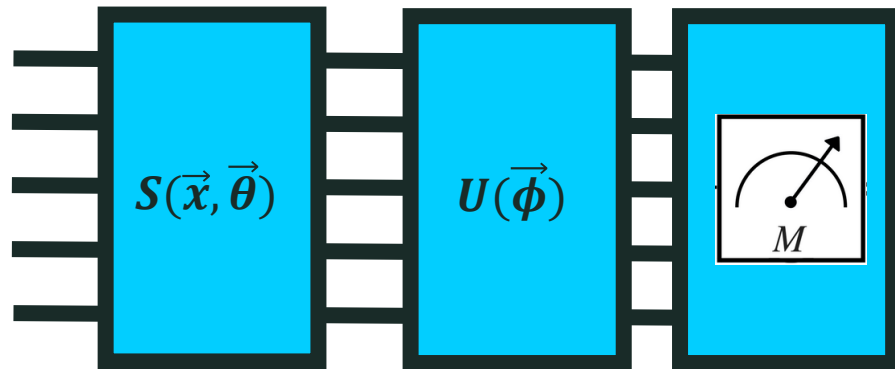


Supervised Learning

$$|\psi_0\rangle \rightarrow |\psi(\vec{x}, \vec{\theta})\rangle \rightarrow |\psi(\vec{x}, \vec{\theta}, \vec{\phi})\rangle$$

Codificar los
datos
(quantum
feature space)

Rotar a la base
de medida
correcta



Podemos calcular el Kernel

$$\kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \equiv \langle \Phi(\mathbf{x}_i) | \Phi(\mathbf{x}_j) \rangle$$

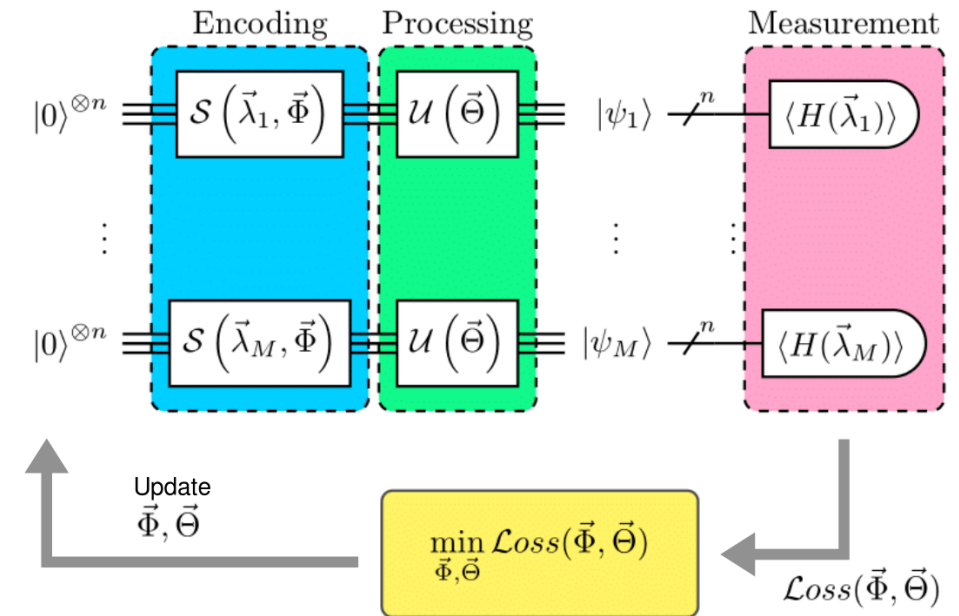
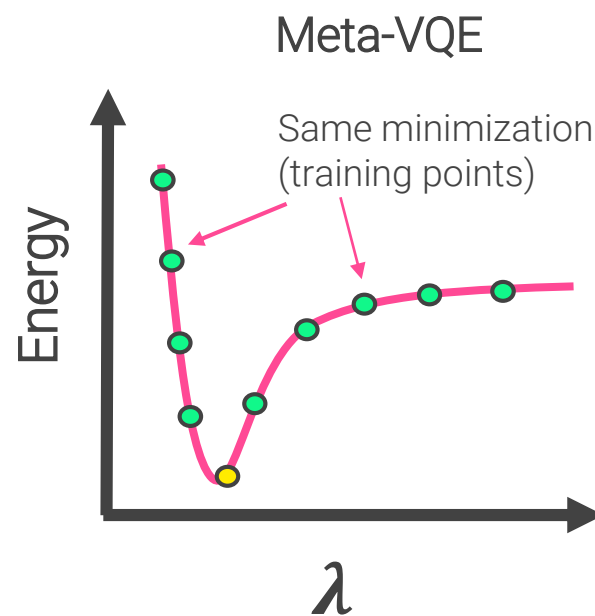
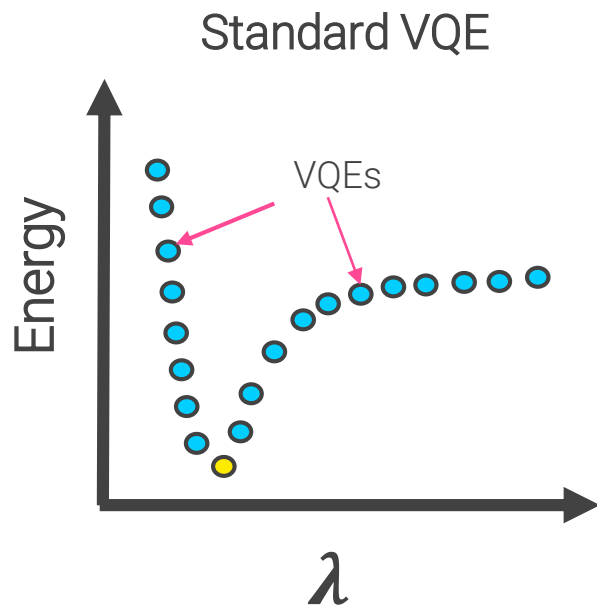
O minimizar la fidelidad respecto a un estado target

$$C(\theta) = \sum_{i=1}^{\mathcal{D}} (1 - |\langle y_i | \Psi(\mathbf{x}_i, \theta) \rangle|^2)$$

Bonus: QML aplicado a many-body g.s.

Hamiltoniano parametrizado $H(\vec{\lambda})$

Objetivo: hallar el circuito cuántico que codifica el ground state del Hamiltoniano para cualquier valor de $\vec{\lambda}$

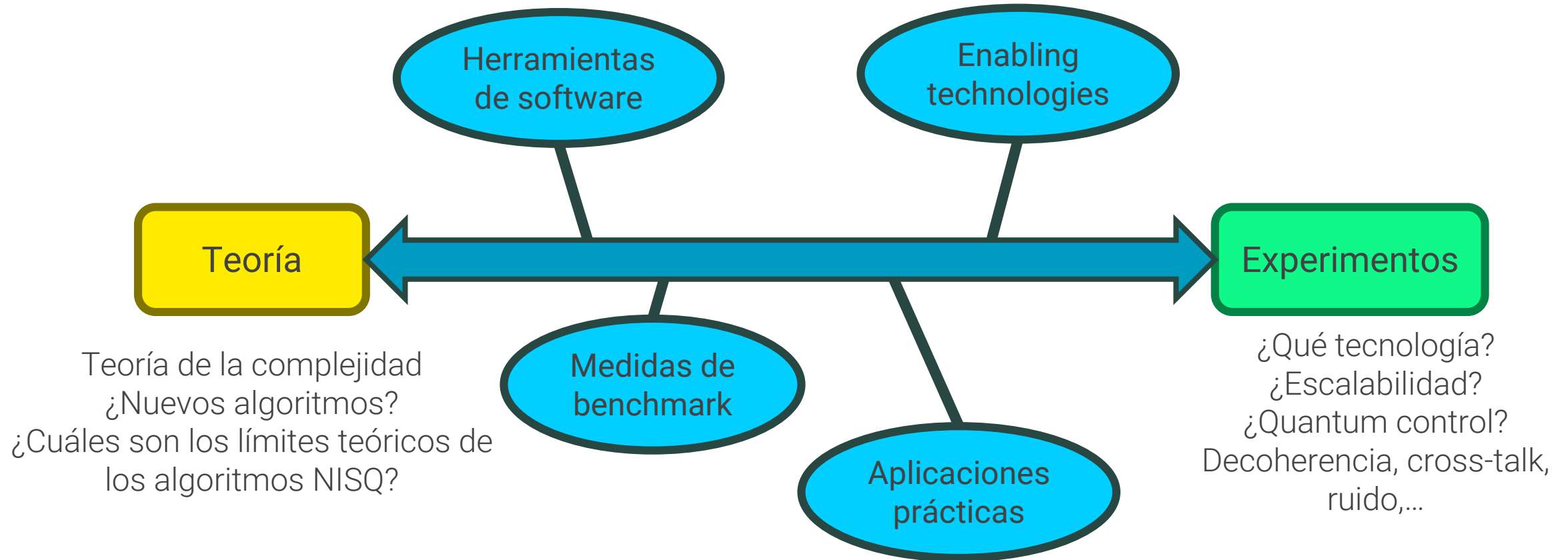


Una colección de VQE con una función de coste global que utilizamos para aprender el perfil de la energía del ground state.

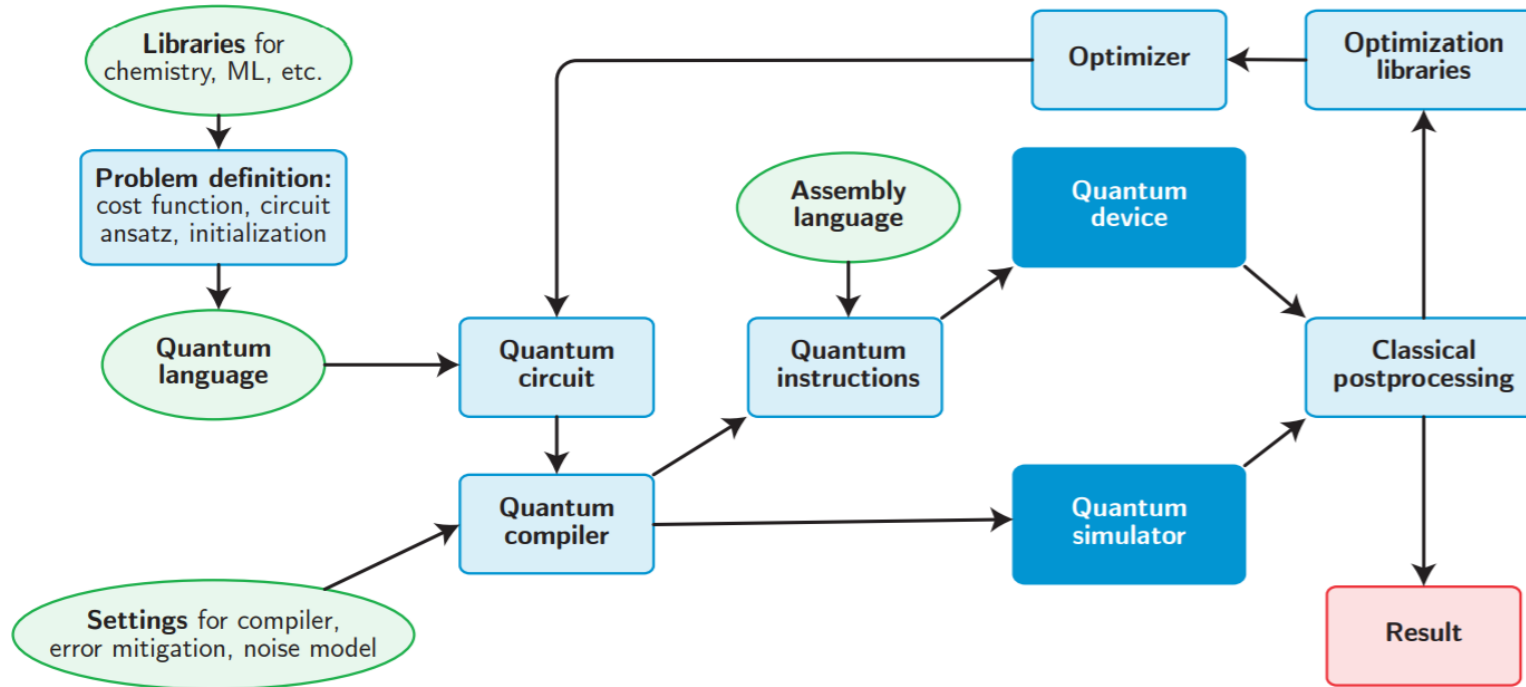


Horizonte NISQ

NISQ road

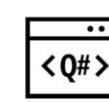


Cómo programar un algoritmo NISQ



J. Kottmann, S. Alperin-Lea, T. Tamayo-Mendoza, et. al.,
Quantum Sci. Technol. 6 024009 (2021).

GITHUB:
[/aspuru-guzik-group/tequila](https://github.com/aspuru-guzik-group/tequila)
[/aspuru-guzik-group/tequila-tutorials](https://github.com/aspuru-guzik-group/tequila-tutorials)



PENNY
LANE

PYQUIL

Qibo



GPyOpt

Phoenix

Mitiq



OpenFermion

Siguiente objetivo: fault-tolerant quantum computation



Quantum Error Correction: protege la información cuántica en un estado altamente entrelazado.

QEC conlleva un gran coste en términos de qubits: miles (millones) de qubits son necesarios para implementar un experimento práctico.

Por eso tenemos NISQ... pero muchos algoritmos NISQ también se pueden usar en la **Fault-Tolerant era**.

El ruido limita los algoritmos NISQ como los VQAs.

El siguiente objetivo es la computación cuántica Fault-tolerant. No sabemos cuánto tiempo va a conllevar, pero **hay muchísima física que explorar en el camino!**



Agradecimientos



Alán Aspuru-Guzik



Leong-Chuan Kwek



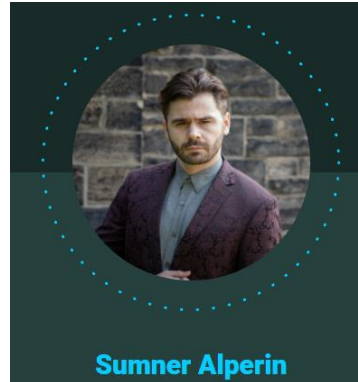
Kishor Bharti



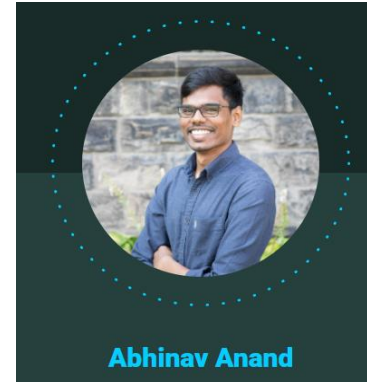
Thi Ha Kyaw



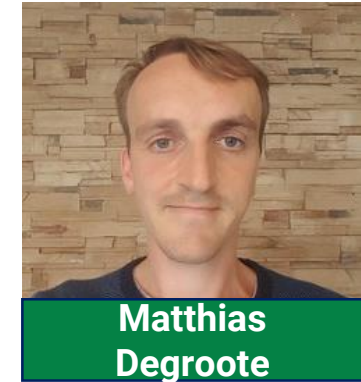
Tobias Haug



Sumner Alperin



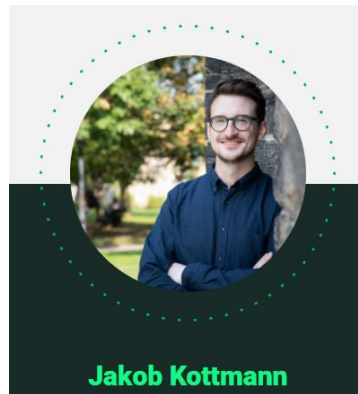
Abhinav Anand



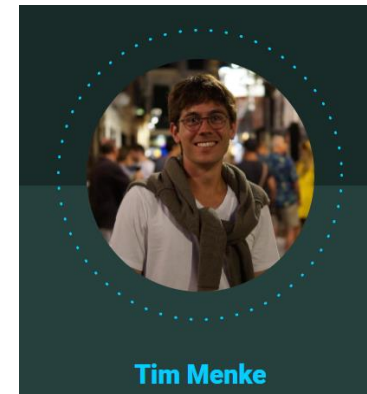
Matthias
Degroote



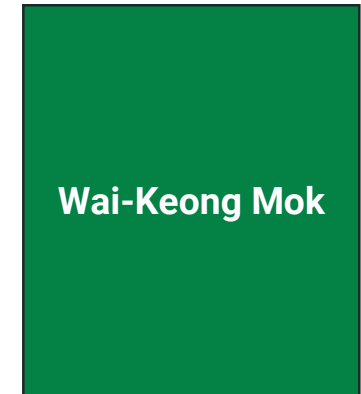
Hermanni
Heimonen



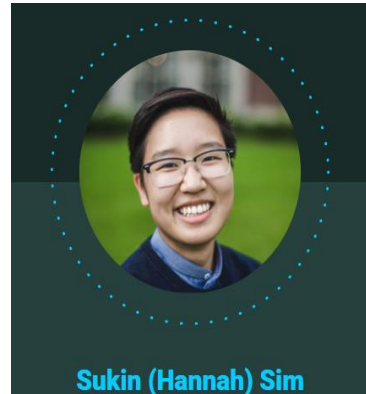
Jakob Kottmann



Tim Menke



Wai-Keong Mok



Sukin (Hannah) Sim

