

Variational Quantum Eigensolver

David Machado Couto Bezerra

davidmachado@alu.ufc.br

Campus Quixadá

1 de outubro de 2024



UNIVERSIDADE
FEDERAL DO CEARÁ
CAMPUS QUIXADÁ

Sumário

- 1 Introdução
- 2 Ansatz
- 3 Função de Custo
- 4 Loop de Otimização
- 5 Final



Quantum Phase-Estimation

Problema da estimativa de fase

Entrada: Um estado quântico de n qubits $|\psi\rangle$ e um circuito quântico unitário para uma operação de n -qubits U

Promessa: $|\psi\rangle$ é um autovetor de U

Saída: uma aproximação para o número $\theta \in [0, 1)$ que satisfaz

$$U|\psi\rangle = e^{2\pi i\theta} |\psi\rangle$$



Quantum Phase-Estimation

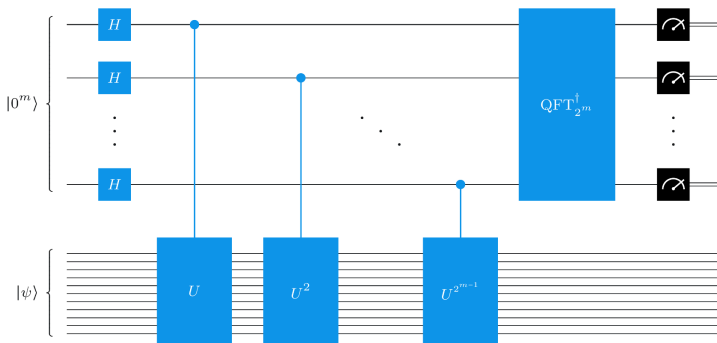


Figura: Procedimento Geral do QPE.



Introdução

- A computação quântica é uma tecnologia emergente que aproveita as leis da mecânica quântica para solucionar problemas demasiadamente complexos para os computadores clássicos.
- Problemas que envolvem combinações complexas em computadores clássicos recorrem frequentemente a algoritmos de força bruta, os quais consomem grande quantidade de memória.
- Diferentemente, computadores quânticos têm a capacidade de processar essas combinações exponencialmente mais rápido, explorando superposições e entrelaçamento de estados quânticos.



VQE: Motivação

Minimizar a energia de um sistema

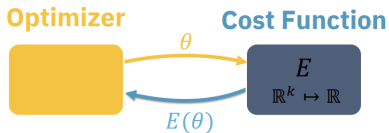


Figura: Fluxo VQE

- Inicializar parâmetros θ_0
- Repetir:
 - **Quântico:** Avaliar $E(\theta_i)$
 - **Clássico:** Escolher θ_{i+1}



Workflow

- Algoritmos variacionais incluem vários componentes modulares que podem ser combinados e otimizados:
 - 1 **Inicialização do Problema:** Inicialização no estado $|0\rangle$ para um estado $|\rho\rangle$ utilizando um U_r .
 - 2 **Preparar o Ansatz:** Começar a otimização de $|\rho\rangle$ para $|\psi(\theta)\rangle$, utilizando de um operador $U_v(\theta)$.
 - 3 **Avaliar a função de custo:** Codificar o problema(função de custo) em uma combinação linear de operadores de Pauli e executar no circuito montado.
 - 4 **Otimizar Parâmetros:** enviar os resultados para o otimizador clássico(algoritmo de otimização) e com isso ser feito uma nova escolha de valores de θ .
 - 5 **Modificar Ansatz e repetir:** o processo todo é repetido até que o critério do otimizador clássico seja cumprido e um conjunto otimizado de θ seja encontrado.

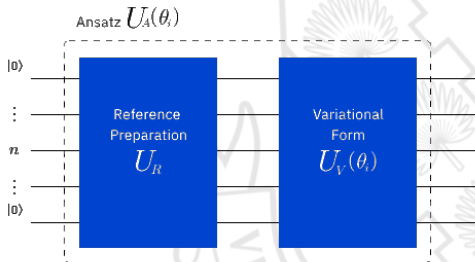


Trabalhos Relacionados

- **Variational Quantum Algorithm Applied to Collision Avoidance of Unmanned Aerial Vehicles**
- **Using the Parameterized Quantum Circuit combined with Variational-Quantum-Eigensolver (VQE) to create an Intelligent social workers' schedule problem solver**
- **Quantum machine learning for particle physics using a variational quantum classifier**
- **Variational Quantum Classifier for Binary Classification: Real vs Synthetic Dataset**



Ansatz



O Ansatz

- A inicialização inicial $U_R |0\rangle = |\rho\rangle$ utiliza um estado referencial para promover uma convergência eficiente em direção ao estado de energia mínima.
- O Ansatz variacional $U_V(\theta)$ consiste em uma coleção de estados parametrizados que facilitam na busca pelo estado ótimo:

$$|\psi(\theta)\rangle = U_V(\theta) |\rho\rangle = U_V(\theta) U_R |0\rangle$$

- Em um sistema de n-qubits, explorar o espaço completo exigiria cerca de 2^n parâmetros. Portanto, desenvolvem-se Ansatz eficientes que requerem menos parâmetros para uma busca mais viável e otimizada.



Ansatz Heurístico

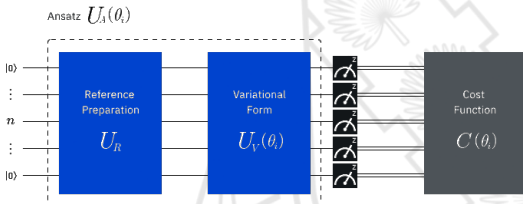
Existem conjuntos de Ansatz mais gerais que podem ser utilizados caso não se possua informação extra que possa servir de ajuda. Algumas questões tem que ser analisadas:

- **Velocidade:** Ao reduzir o espaço de busca, o algoritmo pode rodar mais rápido.
- **Precisão:** No entanto, reduzir o espaço pode arriscar excluir a solução real do problema, levando a soluções subótimas.
- **Ruído:** Circuitos mais profundos são afetados por ruído, então precisamos experimentar com a conectividade do nosso ansatz, portas e fidelidade das portas.

Existe um *trade-off* fundamental entre qualidade (ou até mesmo solvabilidade) e velocidade.



Função de Custo



Função Custo

- Em geral funções de custo são utilizadas para informar o quão perto se encontra um estado atual da solução ótima.
- O processo de minimização da função custo é iterativo e envolve o uso de algoritmos clássicos de otimização.
- Existe a possibilidade do Ansatz não definir a solução no espaço de busca, assim sendo necessário explorar outros ansatz.



O que é um Hamiltoniano?

Se o sistema está no estado $|\psi\rangle$, a energia do sistema é: $\langle\psi|H|\psi\rangle$

Queremos saber a energia mínima de H . Em outras palavras: o menor autovalor, λ_0

$$\min_{\theta} \langle\psi|H|\psi\rangle = \langle\psi_0|H|\psi_0\rangle = \lambda_0$$

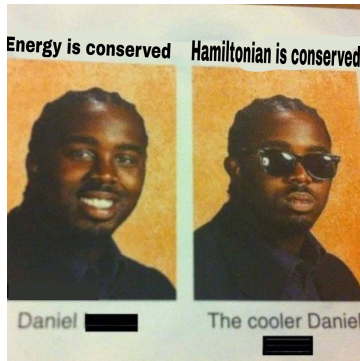
Obs:

O operador H é o Hamiltoniano, ele é uma ferramenta matemática que descreve a energia total de um sistema.



Hamiltoniano

$H = K + V$, K energia cinética e V energia potencial... basicamente energia total no sistema clássico kkkk



Variational Theorem

Considerar a decomposição espectral:

$$H = \sum_{k=0}^{N-1} \lambda_k |\phi_k\rangle \langle \phi_k|$$

Assim, $\hat{H}|\phi_k\rangle = \lambda_k|\phi_k\rangle$ e a energia esperada do sistema é dada por:

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \langle \psi | \left(\sum_{k=0}^{N-1} \lambda_k |\phi_k\rangle \langle \phi_k| \right) | \psi \rangle = \sum_{k=0}^{N-1} \lambda_k |\langle \psi | \phi_k \rangle|^2$$



Variational Theorem

Se levar em conta $\lambda_0 \leq \lambda_k$, para todo k temos:

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \sum_{k=0}^{N-1} \lambda_k |\langle \psi | \phi_k \rangle|^2 \geq \sum_{k=0}^{N-1} \lambda_0 |\langle \psi | \phi_k \rangle|^2 = \lambda_0$$

Em resumo, a energia esperada de qualquer sistema é maior do que a energia mais baixa ou energia do estado fundamental. Se considerarmos uma função de custo dada por $C(\theta) := \langle \psi(\theta) | \hat{H} | \psi(\theta) \rangle$ e quisermos minimizá-la, o mínimo sempre satisfará:

$$\min_{\theta} C(\theta) = \min_{\theta} \langle \psi(\theta) | \hat{H} | \psi(\theta) \rangle \geq \lambda_0.$$



Como Representar um Hamiltoniano?

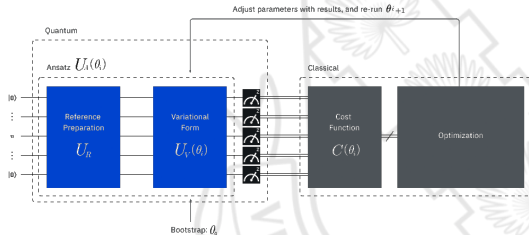
- **Segunda Quantização:** um formalismo matemático na mecânica quântica que permite a descrição de sistemas de muitas partículas.
- A segunda quantização oferece uma maneira de representar o Hamiltoniano em uma forma que pode ser mapeada para um circuito quântico.
- Operadores de Criação e Aniquilação: o Hamiltoniano é expresso em termos de operadores de criação (a_i^\dagger) e aniquilação (a_i).
- Utilizar mapeamentos como o de Jordan-Wigner, Bravyi-Kitaev ou outros, que transformam os operadores de criação e aniquilação em operadores que agem em qubits.



Segunda Quantização



Loop de Otimização

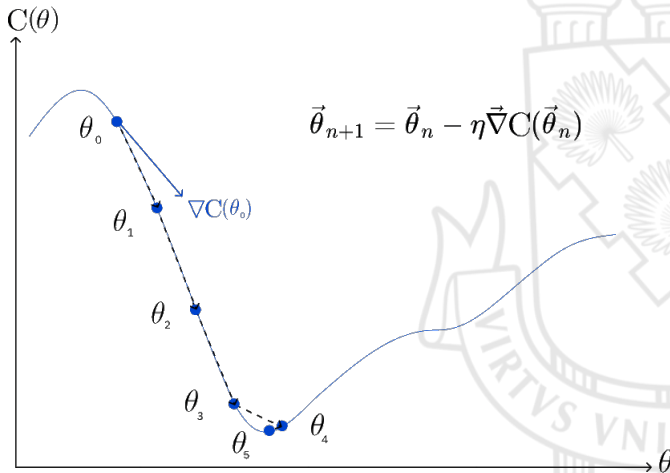


Tipos de Otimizadores

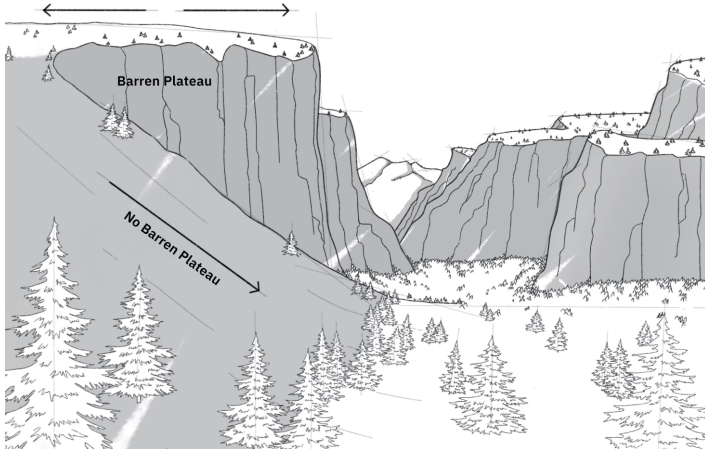
- Otimizadores locais são projetados para encontrar um mínimo local próximo ao ponto inicial.
 - São eficientes em termos de tempo e recursos computacionais, mas correm o risco de ficar presos em mínimos
- Otimizadores globais são projetados para buscar o mínimo global de uma função de custo.
 - são particularmente úteis quando a função de custo é não-convexa e possui muitos mínimos locais.
- Dado que o VQE é frequentemente utilizado para sistemas onde uma boa estimativa inicial (Ansatz) é conhecida os otimizadores locais podem ser bastante eficazes.



Gradientes



Barren Plateau



UNIVERSIDADE
FEDERAL DO CEARÁ
CAMPUS QUIXADÁ

Visão Geral

Vantagens:

- Utiliza circuitos pouco profundos
- Resulta em uma representação eficiente do estado fundamental
- Resistente ao ruído incoerente E coerente

Áreas de Aplicação do VQA:

- **Química:**
 - Preparação do Estado Fundamental
 - Preparação do Estado Excitado
- **Otimização:**
 - Satisfação de Restrições
 - Caixeiro Viajante
 - Agrupamento (Clustering)



Dúvidas

Perguntas?



UNIVERSIDADE
FEDERAL DO CEARÁ
CAMPUS QUIXADÁ