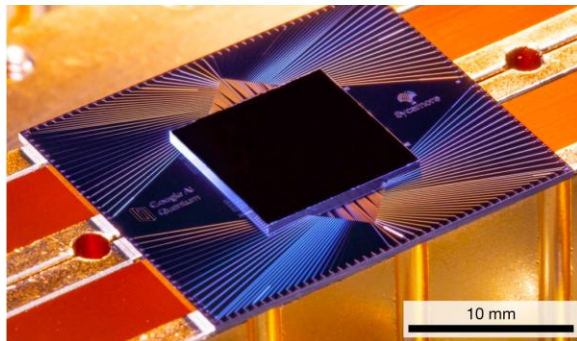


Algoritmos Variacionales Cuánticos

Leonardo Zambrano

Supremacía cuántica

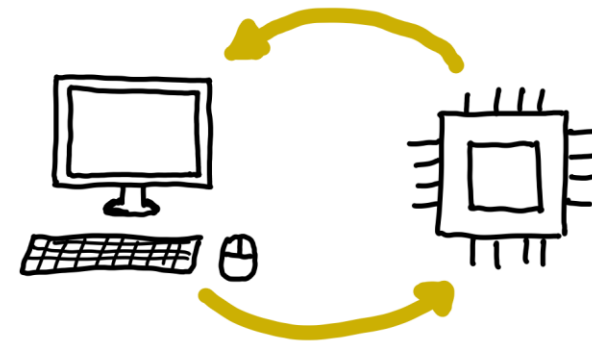
- Tenemos supremacía cuántica cuando **un computador cuántico resuelve un problema cualquiera mucho más rápido** que los computadores clásicos más potentes disponibles.
- En 2019 Google afirmó haberla alcanzado con su procesador Sycamore.
- No resuelve ningún problema útil, y solo sirve para desmentir la hipótesis de Church-Turing.



"Quantum supremacy using a programmable superconducting processor", Arute et. al. Nature 574, 505–510 (2019)

Ventaja cuántica

- Tenemos ventaja cuántica cuando **un computador cuántico resuelve un problema útil mucho más rápido** que los computadores clásicos más potentes disponibles.
- Con algoritmos como Shor y Grover podemos tener ventaja cuántica.
- Se piensa que los algoritmos cuánticos variacionales (VQAs) pueden darnos ventaja cuántica en el futuro próximo.



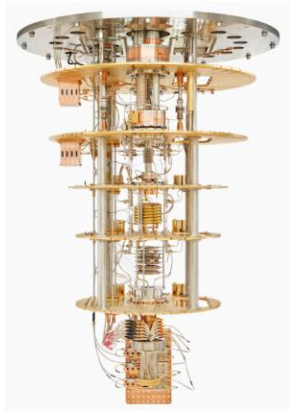
Computadores Cuánticos NISQ

- **Número intermedio de qubits:** Decenas o cientos de qubits.
- **No simulables:** No se puede usar computadores clásicos para simular estos dispositivos eficientemente.
- **Susceptibilidad al ruido y errores:** Los qubits NISQ son más susceptibles al ruido y a los errores cuánticos.
- **Aplicaciones Específicas:** Los NISQ tienen el potencial de abordar problemas específicos en áreas como la simulación cuántica, optimización combinatoria y química cuántica.

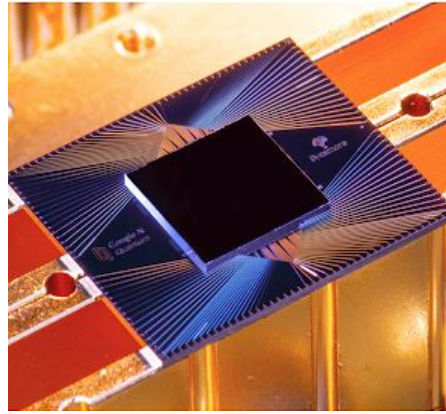
Computadores cuánticos NISQ



IBM



Rigetti Computing



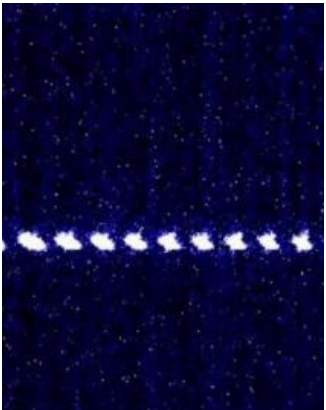
Google



D-Wave Systems

Circuitos superconductores

- Operaciones rápidas.
- Escalable.



IonQ



Honeywell
Quantum Solutions

Iones atrapados

- Operaciones precisas.
- Largos tiempos de coherencia.



Xanadu Quantum
Technologies

Fotones

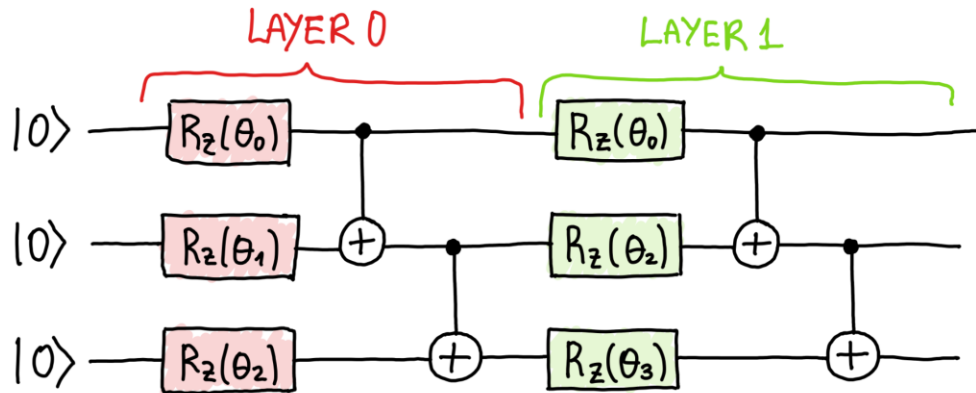
- Buena transmisión de información.
- Funcionan a temperaturas más altas.

Variational Quantum Algorithms (VQAs)

- Representan la solución de problemas como el valor mínimo de funciones.
- Aplicaciones incluyen encontrar la energía mínima de moléculas, optimizar portafolios financieros y machine learning.
- Solo usan un computador cuántico para preparar un estado cuántico que depende de parámetros clásicos y que codifica la solución al problema.
- Un computador clásico ajusta los parámetros basándose en mediciones del estado.
- El proceso se repite hasta encontrar la solución al problema.

Variational Quantum Algorithms (VQAs)

Ansatz

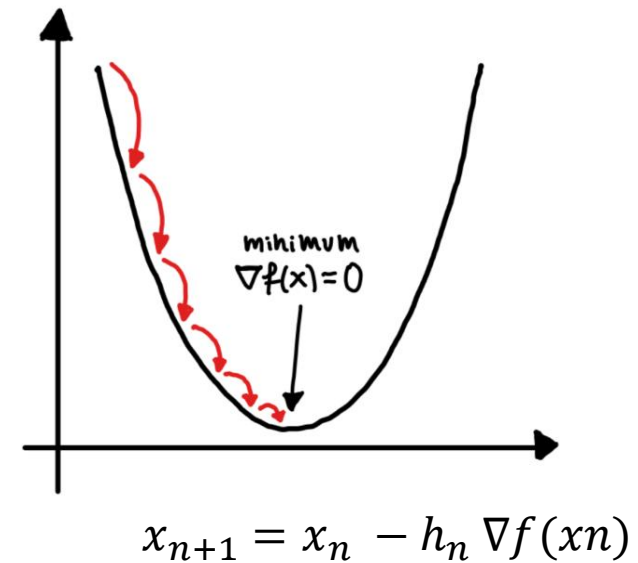


Función de costo

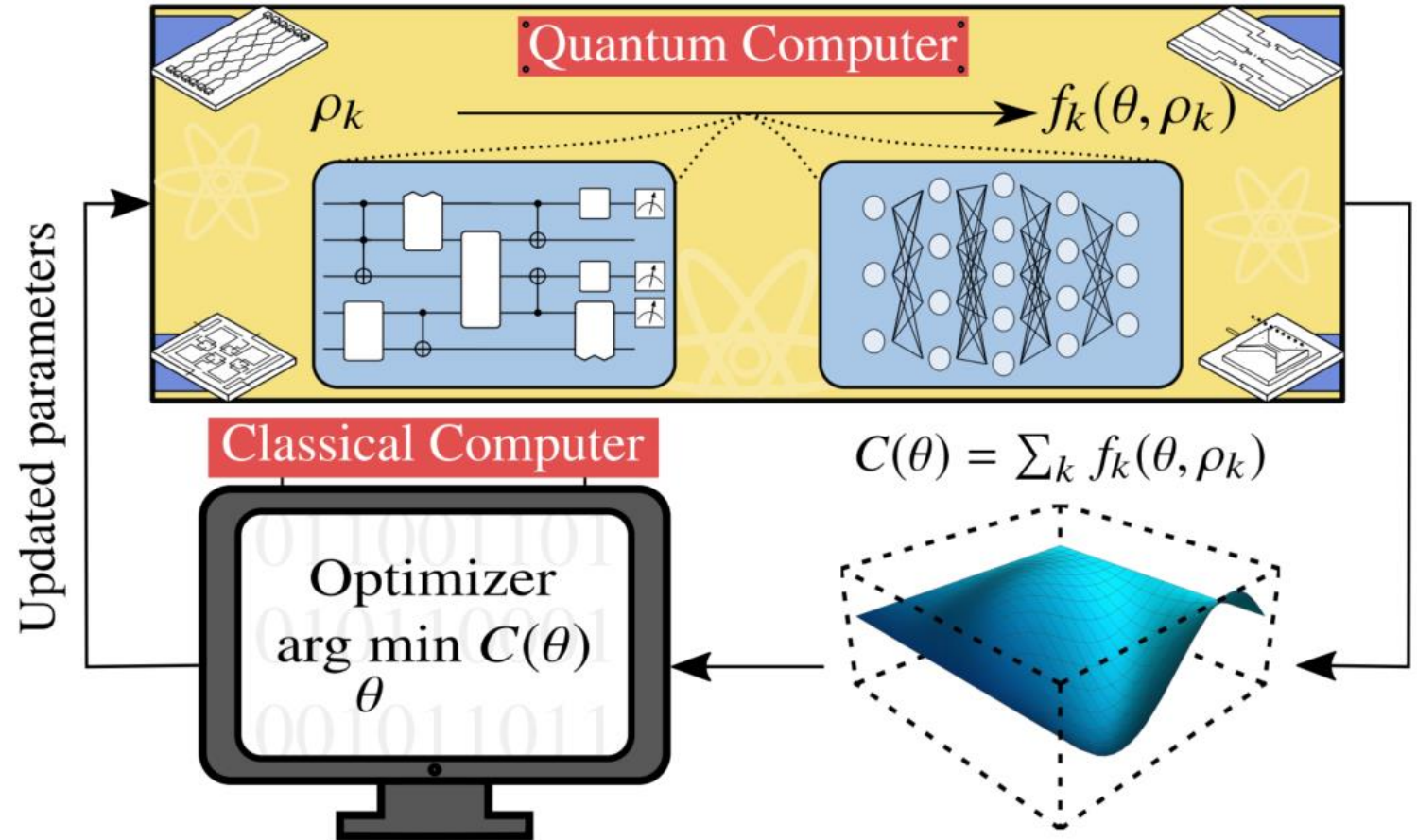
$$E(\theta) = \langle \psi | U(\theta) H U^\dagger(\theta) | \psi \rangle$$

$$L(\theta) = \sum_k c_k \langle \psi_k | U(\theta) O_k U^\dagger(\theta) | \psi_k \rangle$$

Algoritmo de optimización



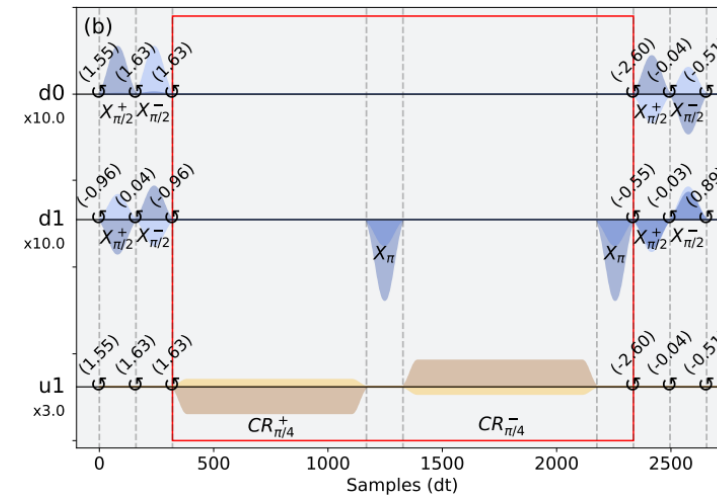
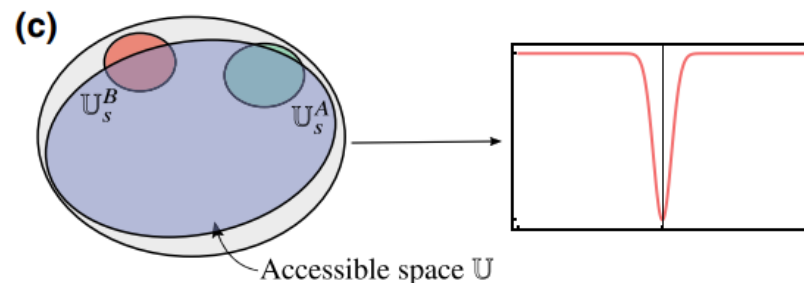
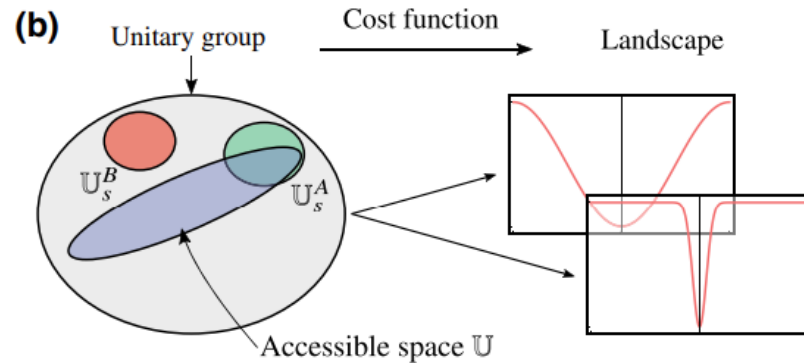
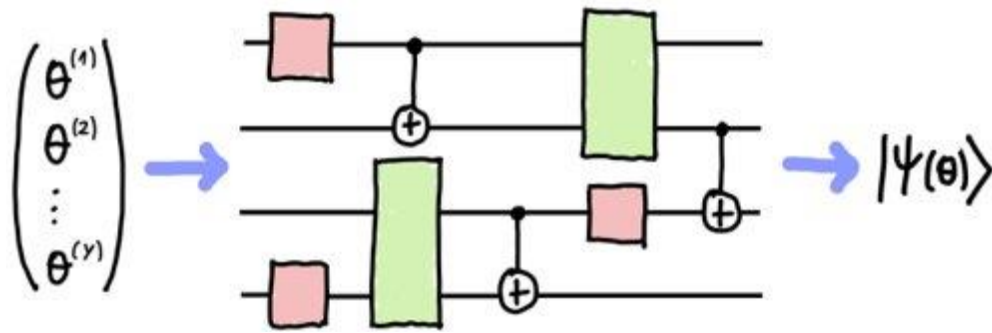
1. **Inicialización:** Elige ansatz, número de qubits, mediciones, método de optimización, parámetros iniciales.
2. **Evaluación:** Construye el circuito dependiendo de los parámetros clásicos y mide.
3. **Cálculo del gradiente:** usando los resultados de las mediciones.
4. **Actualización de parámetros:** modificamos los parámetros del circuito cuántico.
5. **Prueba de convergencia:** Decidimos si dejar de optimizar o no.



"Variational quantum algorithms", Cerezo et. al. Nat. Rev. Phys. 3, 625–644 (2021)

"The Variational Quantum Eigensolver: A review of methods and best practices", Tilly et. al. Phys. Rep. 986, 1-128 (2022)

Circuitos cuánticos parametrizados



“Qiskit pulse: programming quantum computers through the cloud with pulses”, Thomas Alexander et. al. *Quantum Sci. Technol.* 5, 044006 (2020).

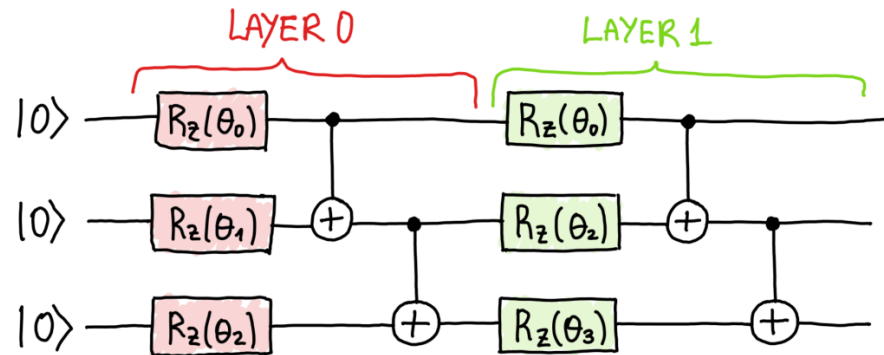
Expresividad: el ansatz debe ser capaz de representar la solución.

Entrenabilidad: el ansatz debe ser fácil de entrenar.

“Connecting Ansatz Expressibility to Gradient Magnitudes and Barren Plateaus”, Zoë Holmes et. al. *PRX Quantum* 3, 010313 (2022).

Circuitos cuánticos parametrizados

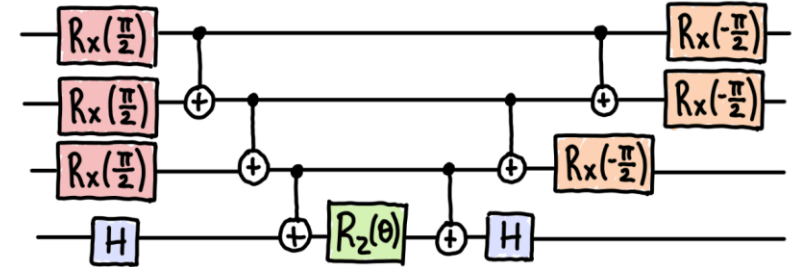
Hardware Efficient ansatz



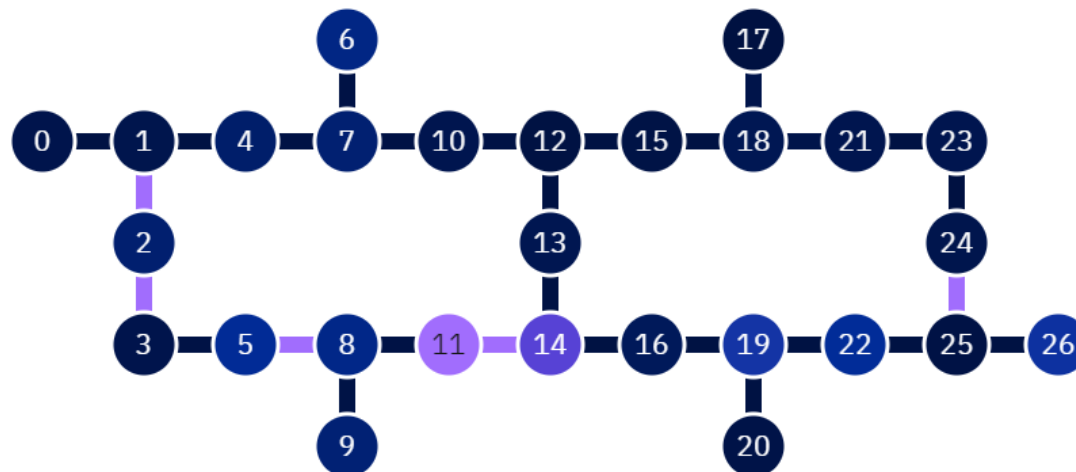
"Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets", Kandala et. al. Nature 549, 242–246 (2017)

Unitary Coupled Cluster ansatz

$$|\psi(\theta)\rangle = U_1(\theta_1)U_2(\theta_2) \dots U_m(\theta_m)|11 \dots 0\rangle$$



"A variational eigenvalue solver on a photonic quantum processor", Peruzzo et. al. Nat. Commun. 5, 4213 (2014)



Funciones de costo

Quantum Chemistry:

$$E(\theta) = \langle \psi | U(\theta) H U^\dagger(\theta) | \psi \rangle.$$

Optimization and Combinatorial problems:

$$C(\theta) = \langle + | U(\beta, \gamma) H_{MAXCUT} U^\dagger(\beta, \gamma) | + \rangle.$$

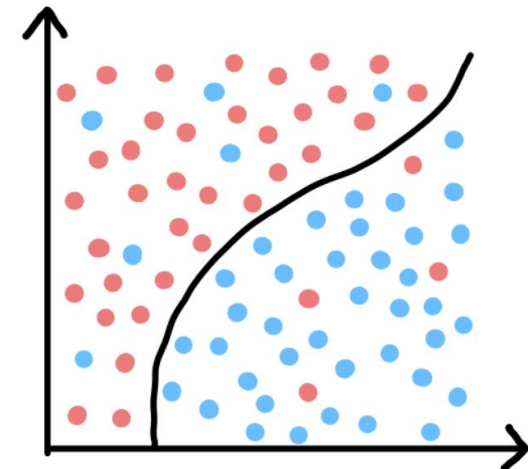
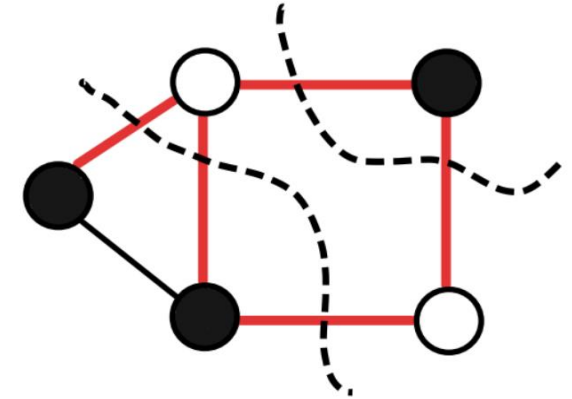
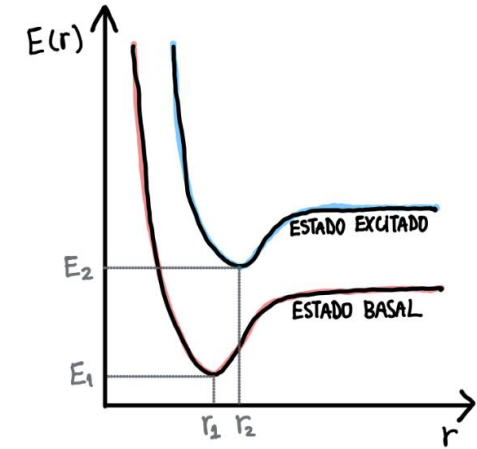
Machine Learning:

$$L(\theta) = \sum_k c_k \langle \psi_k | U(\theta) O_k U^\dagger(\theta) | \psi_k \rangle.$$

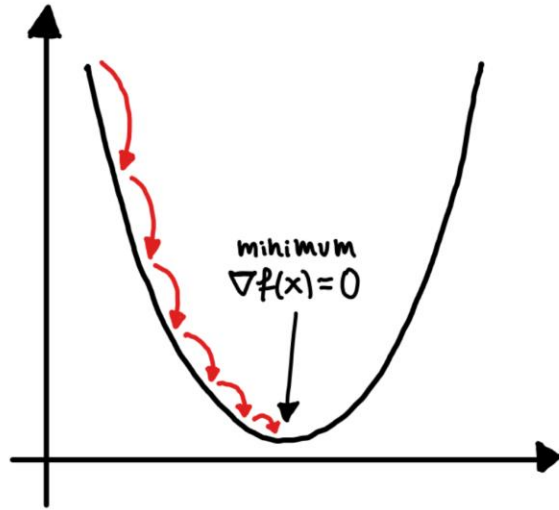
"The Variational Quantum Eigensolver: A review of methods and best practices", Tilly et. al. Phys. Rep. 986, 1-128 (2022)

"A quantum approximate optimization algorithm", Farhi et. al. arXiv:1411.4028

"Quantum machine learning", Biamonte et. al. Nature 549, 7671 (2017)



Algoritmos de optimización



$$x_{n+1} = x_n - h_n \nabla f(x_n)$$



Gradiente descendente

Input: función f , parámetros iniciales x_0 , número de iteraciones N y tasa de aprendizaje h_n .

for $n = 0$ to $N - 1$:

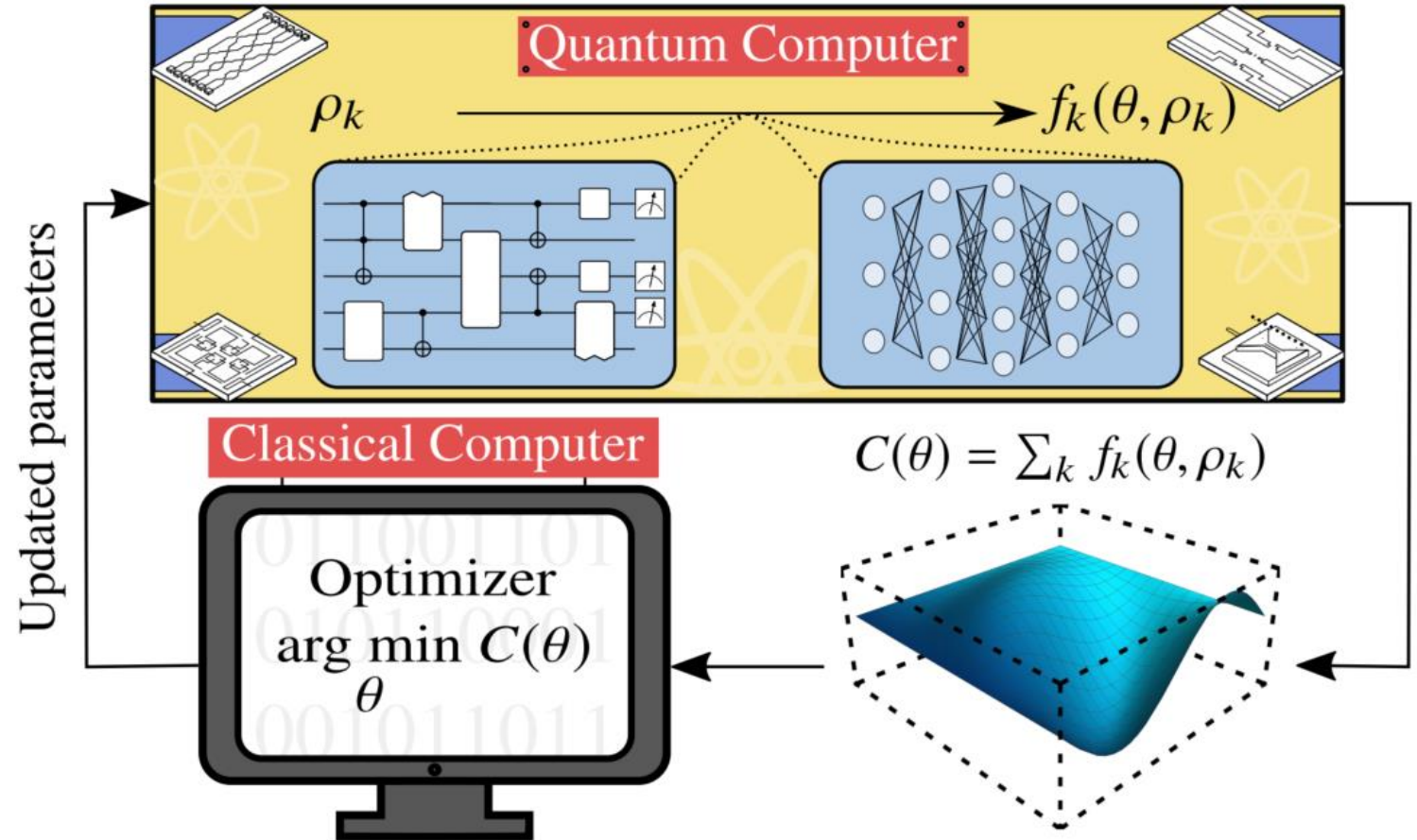
 calcular gradiente $\nabla f(x_n)$

$$x_{n+1} = x_n - h_n \nabla f(x_n)$$

end for

Output x_N

1. **Inicialización:** Elige ansatz, número de qubits, mediciones, método de optimización, parámetros iniciales.
2. **Evaluación:** Construye el circuito dependiendo de los parámetros clásicos y mide.
3. **Cálculo del gradiente:** usando los resultados de las mediciones.
4. **Actualización de parámetros:** modificamos los parámetros del circuito cuántico.
5. **Prueba de convergencia:** Decidimos si dejar de optimizar o no.

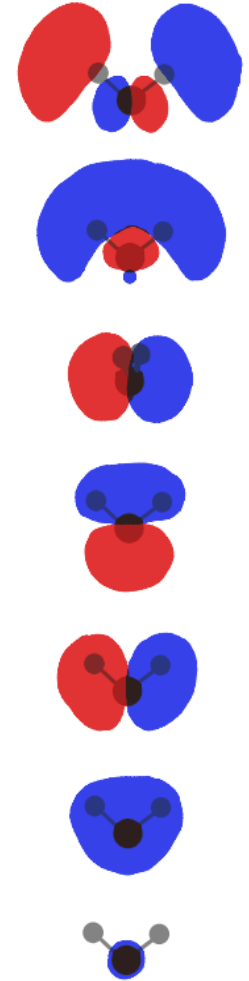
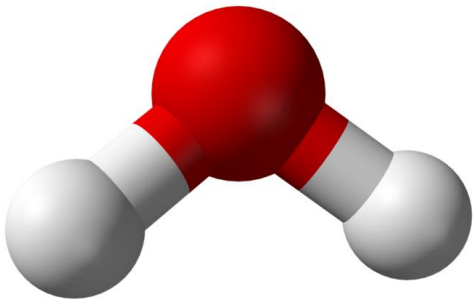


"Variational quantum algorithms", Cerezo et. al. Nat. Rev. Phys. 3, 625–644 (2021)

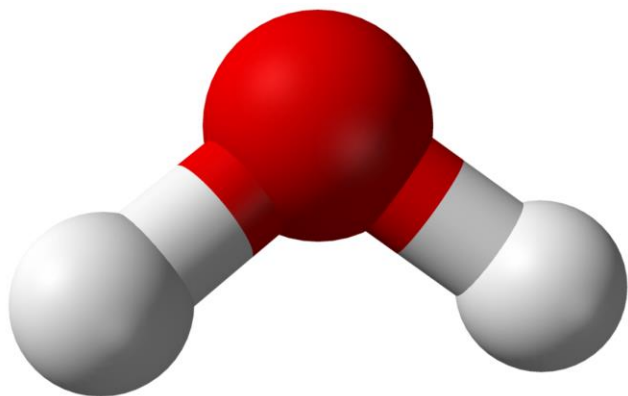
"The Variational Quantum Eigensolver: A review of methods and best practices", Tilly et. al. Phys. Rep. 986, 1-128 (2022)

Variational quantum eigensolver (VQE)

- Átomos y moléculas son los componentes básicos de toda la materia.
- Los orbitales describen la probabilidad de encontrar un electrón en el espacio.
- En el estado basal solo los orbitales de menor energía están poblados.
- Para encontrar los orbitales tenemos que solucionar la ecuación de Schrödinger.
- Para muchas aplicaciones solo hace falta conocer unos pocos niveles.



VQE: Hamiltoniano molecular



El Hamiltoniano de una molécula es

$$H = - \sum_i \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{i,A} \frac{Z_A}{r_{iA}} + \sum_{i>j} \frac{1}{r_{ij}} + \sum_{B>A} \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}} - \sum_A \frac{\nabla_A^2}{2M_A}$$

Energía cinética electrones	Interacción electrones- protones	Interacción electrones	Interacción protones	Energía cinética núcleo
-----------------------------------	--	---------------------------	-------------------------	----------------------------

H puede ser transformado a

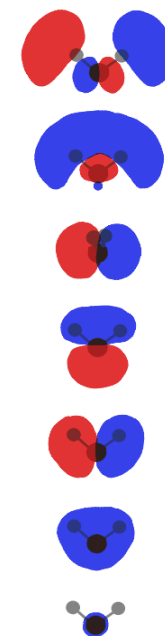
$$H = \sum_{pq} h_{pq} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q + \frac{1}{2} \sum_{pqrs} h_{pqrs} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_r \hat{a}_s,$$

donde

$$\{ \hat{a}_p, \hat{a}_q^\dagger \} = \delta_{pq}$$

$$\{ \hat{a}_p^\dagger, \hat{a}_q^\dagger \} = \{ \hat{a}_p, \hat{a}_q \} = 0$$

Los estados son de la forma $|00 \dots 0\rangle, |00 \dots 1\rangle, \dots |01 \dots 1\rangle, |11 \dots 1\rangle$.



VQE: Principio variacional

Tenemos $H = \sum_{pq} h_{pq} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q + \frac{1}{2} \sum_{pqrs} h_{pqrs} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_r \hat{a}_s$ y queremos conocer su energía mínima.

Principio variacional: Sea H un Hamiltoniano con espectro discreto y $|\psi\rangle$ un estado cuántico arbitrario. Luego

$$E_0 \leq \langle \psi | H | \psi \rangle,$$

donde E_0 es la energía mínima del sistema.

Demostración: La descomposición espectral del Hamiltoniano es $H = \sum_n E_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|$. Luego el estado puede ser escrito como $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$ y

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_{mn} c_n^* c_m \langle \psi_n | H | \psi_m \rangle = \sum_{mn} c_n^* c_m E_m \langle \psi_n | \psi_m \rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n.$$

La energía del estado basal es la mínima posible, $E_n \geq E_0 \forall n$. Luego

$$\langle \psi | H | \psi \rangle \geq E_0 \sum_n |c_n|^2 = E_0.$$

VQE: Mapeo de fermiones a qubits

El Hamiltoniano original es $H = \sum_{pq} h_{pq} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q + \frac{1}{2} \sum_{pqrs} h_{pqrs} \hat{a}_p^\dagger \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_r \hat{a}_s$, con $\{ \hat{a}_p, \hat{a}_q^\dagger \} = \delta_{pq}$ y $\{ \hat{a}_p^\dagger, \hat{a}_q^\dagger \} = \{ \hat{a}_p, \hat{a}_q \} = 0$.

- Los operadores fermiónicos no pueden ser implementados directamente en un computador cuántico.
- Los mapeos de fermiones a qubits transforman cada operador \hat{a}_i y \hat{a}_j^\dagger a productos tensoriales de X, Y, Z e I .
- El mapeo más conocido es el de Jordan-Wigner.

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad Y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \hat{a}_1^\dagger &= (X - iY) \otimes 1 \otimes 1 \otimes \cdots \otimes 1 \\ \hat{a}_2^\dagger &= Z \otimes (X - iY) \otimes 1 \otimes \cdots \otimes 1 \\ \hat{a}_3^\dagger &= Z \otimes Z \otimes (X - iY) \otimes \cdots \otimes 1 \\ &\vdots \\ \hat{a}_N^\dagger &= Z \otimes Z \otimes Z \otimes \cdots \otimes (X - iY) \end{aligned}$$

Para la molécula de Hidrogeno, los Hamiltonianos original y transformado son:

$$\begin{aligned} H = & -1.25 \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0 - 1.25 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - 0.47 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 - 0.47 \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_3 \\ & + 0.67 \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_0 + 0.69 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_3 \hat{a}_2 + 0.66 \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_3 \hat{a}_0 \\ & + 0.66 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_1 + 0.48 \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 \hat{a}_0 + 0.48 \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_3 \hat{a}_1 \\ & + 0.18 \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_3 \hat{a}_2 + 0.18 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_0 + 0.18 \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_2 \\ & + 0.18 \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_3 \hat{a}_0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_{JW} = & -0.81 + 0.17 Z_0 + 0.17 Z_1 - 0.22 Z_2 - 0.22 Z_3 \\ & + 0.16 Z_1 Z_0 + 0.12 Z_2 Z_0 + 0.16 Z_2 Z_1 + 0.16 Z_3 Z_0 \\ & + 0.12 Z_3 Z_1 + 0.17 Z_3 Z_2 - 0.04 X_3 X_2 Y_1 Y_0 \\ & + 0.04 X_3 Y_2 Y_1 X_0 + 0.04 Y_3 X_2 X_1 Y_0 - 0.04 Y_3 Y_2 X_1 X_0 \end{aligned}$$

Jacob T. Seeley et. al. The Bravyi-Kitaev transformation for quantum computation of electronic structure, The Journal of Chemical Physics 137, 224109 (2012).

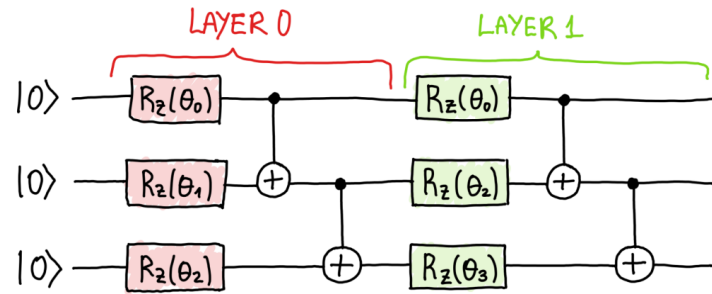
VQE para la molécula de Hidrógeno

Función de costo

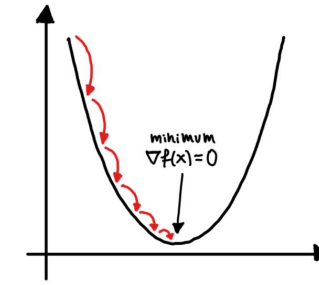
$$E(\theta) = \langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle$$

$$H = -0.81 + 0.17 Z_0 + 0.17 Z_1 - 0.22 Z_2 - 0.22 Z_3 + 0.16 Z_1 Z_0 + 0.12 Z_2 Z_0 + 0.16 Z_2 Z_1 + 0.16 Z_3 Z_0 + 0.12 Z_3 Z_1 + 0.17 Z_3 Z_2 - 0.04 X_3 X_2 Y_1 Y_0 + 0.04 X_3 Y_2 Y_1 X_0 + 0.04 Y_3 X_2 X_1 Y_0 - 0.04 Y_3 Y_2 X_1 X_0$$

Ansatz



Algoritmo de optimización



"Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets", Kandala et. al. Nature 549, 242–246 (2017).

