# Méthodes mathématiques de la théorie quantique - 2022

Bases de l'Information quantique - Day 5

Nana Engo serge.nana-engo@facsciences-uy1.cm

Department of Physics Faculty of Science University of Yaounde I

https://github.com/NanaEngo/Memaquan2022

Bénin, 11-15 Juillet 2022











### Sommaire - Day 5 - 15 Juillet 2022

Variational Quantum Algorithm

Variational Quantum Eigensolver - VQE



Variational Quantum Eigensolver - VQE



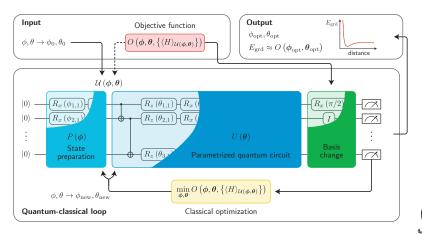
Noisy Intermediate-Scale Quantum (NISQ)

- La finalité du calculateur quantique est une technologie dans laquelle on sait comment contourner de façon fiable et reproductible l'effet néfaste du bruit environnemental dans les qubits (élément de base du calcul quantique). Mais il est difficile de prédire le moment où on en sera là.
  - Mise en œuvre des codes de correction d'erreurs que l'on appelle QEC pour Quantum Error Correction ou plutôt QECC pour QEC Codes
- Depuis 2014 on utilise plutôt le paradigme des NISQ, Noisy Intermediate Scale Quantum computers, des calculateurs quantiques qui sont bruités et non corrigés
  - Ils effectuent des tâches qui dépassent les capacités des calculateurs classiques d'aujourd'hui, mais le bruit dans les portes quantiques limite la taille des circuits quantiques (dizaines à un centaine) qui peut être exécuté de manière fiable
- Les algorithmes quantiques variationnels ou VQA (algorithmes hybrides quantique/classique), inspirés du principe variationnel de la physique quantique, permettent de tirer profit des NISQ



#### Blocs de construction des VQA I

On peut aussi résumer un algorithme variationnel quantique par les quatre composants modulaires suivants :







#### Blocs de construction des VQA II

- la fonction de coût ou fonction objective, qui est l'équation à minimiser variationnellement
- un ou plusieurs Circuit Quantique Paramétré (PQC, Parametrized Quantum Circuit), qui sont les circuits quantiques unitaires dont les paramètres sont manipulés dans la minimisation de la fonction de coût
- 3. le **schéma de mesure**, qui extrait les valeurs attendues nécessaires pour évaluer la fonction de coût
- 4. et l'**optimisation classique**, qui est la méthode utilisée pour obtenir le paramètre de circuit optimal et qui minimise la fonction de coût



### VQA les plus populaires

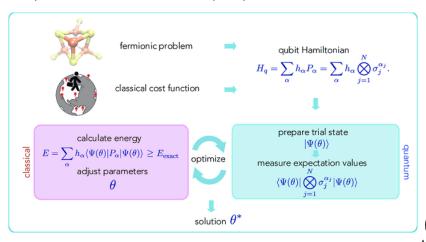
Les algorithmes variationnels quantiques les plus connus de nos jours sont

- Variational Quantum Eigensolver VQE. Le Eigensolver quantique variationnel est utilisé pour approximer le niveau d'énergie le plus bas d'un Hamiltonien donné
- Quantum Approximate Optimization Algorithm QAOA.
  L'algorithme d'optimisation quantique approximatif est principalement utilisé pour les problèmes d'optimisation combinatoire
- Classificateurs variationnels. Un classificateur variationnel est un circuit quantique qui est entraîné sur un ensemble de données pour classer des échantillons de données invisibles, rappelant les classificateurs classiques d'apprentissage automatique.
- Variational Quantum Linear Solvers. Le solveur variationnel quantique linéaire est utilisé pour résoudre des systèmes d'équations linéaires



Schema du principe VQE

#### Chaque VQA a ses nuances, mais le principe de base est le suivant :





# Processeur quantique VQE I

Le processeur quantique comporte trois étapes fondamentales

- 1. Définition du circuit quantique ou porte quantique  $\mathtt{U}(\vec{ heta})$
- 2. Préparation de la fonction d'essai paramétré  $|\Psi(\vec{\theta})\rangle$  appelée Ansatz, qui est essentiellement une estimation de l'état fondamental. A cet effet, on choisit arbitrairement un état de référence  $|\psi_0\rangle$  sur lequel on applique  $\mathrm{U}(\vec{\theta})$ ,

$$|\Psi(\vec{\theta})\rangle = U(\vec{\theta})|\psi_0\rangle \tag{1}$$

3. Mesure de la valeur moyenne ou fonction de coût

$$C(\vec{\theta}) = \langle \Psi(\vec{\theta}) | H | \Psi(\vec{\theta}) \rangle = \langle \psi_0 | U^{\dagger}(\vec{\theta}) H U(\vec{\theta}) | \psi_0 \rangle$$
 (2)

• Selon la décomposition spectrale, H peut être représenté par

$$H = \sum_{i} E_{i} |E_{i}\rangle\langle E_{i}| \tag{3}$$



#### Processeur quantique VQE II

• En vertu du théorème variationnel de Rayleigh-Ritz, la valeur moyenne est toujours supérieure ou égale à la valeur propre  $E_0$  la plus basse du Hamiltonien H, qui correspond à l'état fondamental  $|E_{\rm min}\rangle$ 

$$C(\vec{\theta}) = \langle \psi_0 | \mathbf{U}^{\dagger}(\vec{\theta}) \mathbf{H} \mathbf{U}(\vec{\theta}) | \psi_0 \rangle = \sum_i |\alpha_i|^2 E_i \ge E_{\min}$$
 (4)

• Le problème se résume à trouver un tel choix optimal de paramètres  $\vec{\theta} = (\theta_1, \dots, \theta_n)^T$  à valeurs réelles, permettant de trouver la valeur moyenne minimale  $E_{\min}$  qui est l'énergie de l'état fondamental et l'état correspondant est l'état fondamental  $|E_{\min}\rangle$ .



Variational Quantum Eigensolver - VQE



# Processeur classique VQE

#### En gros, le processeur classique

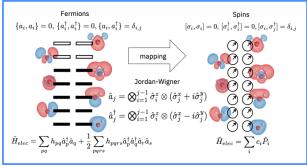
- 1. Minimise la valeur moyenne ou fonction de coût  $C(\vec{\theta})$  en faisant varier les paramètres  $\vec{\theta}$  de l'Ansatz, en utilisant un optimiseur classique
- 2. Itère jusqu'à ce que le critère de convergence soit atteint et que  $|\psi(\vec{\theta})\rangle \simeq |E_0(\vec{\theta})\rangle$



# Passage des $\{a, a^{\dagger}\} \Rightarrow \{\mathbb{I}, X, Y, Z\}$

En simulation quantique, encoder un problème en seconde quantification sur un calculateur quantique revient à établir une correspondance entre les opérateurs d'échelle fermioniques et les opérateurs d'échelle qubit

Mapping de Jordan-Wigner



- Mapping de la parité
- Mapping de Bravyi-Kitaev





Variational Quantum Eigensolver - VQE



#### Variable discrète et variable continue

#### Direct Variable vs Continuous Variable encoding of quantum information

