

Résolution quantique de l'équation de Poisson

Parcours recherche

Clément Mazzocchi Paul Tritz-Heid

École Nationale des Ponts et Chaussées

3 juin 2024

Table des matières

- 1 Introduction au calcul quantique
- 2 Algorithme Harrow-Hassidim-Lloyd (HHL)
- 3 Algorithme Variational Quantum Linear Solver (VQLS)
- 4 Équation de Poisson
- 5 Résultats

Table des matières

- 1 Introduction au calcul quantique
 - Le qubit
 - La porte quantique
 - Le circuit quantique
- 2 Algorithme Harrow-Hassidim-Lloyd (HHL)
- 3 Algorithme Variational Quantum Linear Solver (VQLS)
- 4 Équation de Poisson
- 5 Résultats

Le qubit

Le qubit est l'équivalent sur un ordinateur quantique du bit classique.

Qubit

On se place dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$ associé au système quantique considéré. On prendra ici $\mathcal{H} = \mathbb{C}^N$, où $N = 2^n$. Un qubit $|\psi\rangle$ est un élément de $\mathcal{H}$. Tout qubit se décompose sur les qubits de la base de $\mathcal{H}$. Tout état est normalisé.

Le qubit

Le qubit est l'équivalent sur un ordinateur quantique du bit classique.

Qubit

On se place dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$ associé au système quantique considéré. On prendra ici $\mathcal{H} = \mathbb{C}^N$, où $N = 2^n$. Un qubit $|\psi\rangle$ est un élément de $\mathcal{H}$. Tout qubit se décompose sur les qubits de la base de $\mathcal{H}$. Tout état est normalisé.

Système à un qubit

Avec $n = 1$, on a $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$. Tout état se décompose sous la forme $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ avec $|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ et $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

Le qubit

Le qubit est l'équivalent sur un ordinateur quantique du bit classique.

Qubit

On se place dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H}$ associé au système quantique considéré. On prendra ici $\mathcal{H} = \mathbb{C}^N$, où $N = 2^n$. Un qubit $|\psi\rangle$ est un élément de $\mathcal{H}$. Tout qubit se décompose sur les qubits de la base de $\mathcal{H}$. Tout état est normalisé.

Système à un qubit

Avec $n = 1$, on a $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$. Tout état se décompose sous la forme $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ avec $|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ et $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

Système multi-qubits

Si un état quantique est constitué de m composantes d'espaces d'états respectifs

$\{\mathcal{H}_i\}_{i=0}^{m-1}$, alors l'espace d'états correspondant est $\mathcal{H} = \bigotimes_{i=0}^{m-1} \mathcal{H}_i$.

Pour $|\psi_i\rangle$ des états quantiques des espaces $\mathcal{H}_i$, on a $|\psi\rangle = |\psi_0\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{m-1}\rangle \in \mathcal{H}$. Pour autant, tout état quantique de $\mathcal{H}$ ne peut s'exprimer sous cette forme factorisée.

La porte quantique

La transformation d'un qubit se fait à l'aide d'une porte quantique.

Porte quantique

Une porte quantique U est un opérateur unitaire de $\mathbb{C}^{N \times N}$, vérifiant donc $U^\dagger U = I_N$, qui agit sur les qubits.

Portes de Pauli

Les portes de Pauli forment, avec l'identité, une base des opérateurs linéaires sur $\mathbb{C}^2$.

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

Elles agissent ainsi sur les qubits de la base :

$$\begin{array}{lll} X|0\rangle = |1\rangle & Y|0\rangle = i|1\rangle & Z|0\rangle = |0\rangle \\ X|1\rangle = |0\rangle & Y|1\rangle = -i|0\rangle & Z|1\rangle = -|1\rangle \end{array}$$

La porte quantique

La transformation d'un qubit se fait à l'aide d'une porte quantique.

Porte quantique

Une porte quantique U est un opérateur unitaire de $\mathbb{C}^{N \times N}$, vérifiant donc $U^\dagger U = I_N$, qui agit sur les qubits.

Autres portes usuelles

Porte de Hadamard

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad H|0\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \quad H|1\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

Porte de phase

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \quad S|0\rangle = |0\rangle \quad S|1\rangle = i|1\rangle$$

La porte quantique

La transformation d'un qubit se fait à l'aide d'une porte quantique.

Porte quantique

Une porte quantique U est un opérateur unitaire de $\mathbb{C}^{N \times N}$, vérifiant donc $U^\dagger U = I_N$, qui agit sur les qubits.

Portes contrôlées

La porte CNOT agit sur deux qubits :

$$\text{CNOT} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{array}{ll} \text{CNOT} |00\rangle = |00\rangle & \text{CNOT} |01\rangle = |01\rangle \\ \text{CNOT} |10\rangle = |11\rangle & \text{CNOT} |11\rangle = |10\rangle \end{array}$$

Elle applique la porte X au deuxième qubit si le premier est dans l'état $|1\rangle$, et ne modifie pas le système sinon.

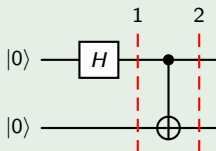
On peut de même définir les versions contrôlées de Y , Z , et de tout autre opérateur unitaire.

Le circuit quantique

On utilise la représentation visuelle du circuit quantique pour modéliser un enchaînement de portes quantiques agissant sur les qubits.

Circuit quantique pour l'état de Bell $|\phi^+\rangle$

Ce circuit fait intervenir la porte de Hadamard, qui agit uniquement sur le premier qubit, et la porte CNOT qui agit sur les deux qubits.



$$|0\rangle \otimes |0\rangle \rightarrow \frac{|0\rangle \otimes |0\rangle}{\sqrt{2}} + \frac{|1\rangle \otimes |0\rangle}{\sqrt{2}} \rightarrow \frac{|0\rangle \otimes |0\rangle}{\sqrt{2}} + \frac{|1\rangle \otimes |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

Table des matières

- 1 Introduction au calcul quantique
- 2 Algorithme Harrow-Hassidim-Lloyd (HHL)
 - Principe général
 - Quantum Fourier Transform (QFT)
 - Quantum Phase Estimation (QPE)
 - Implémentation de HHL
- 3 Algorithme Variational Quantum Linear Solver (VQLS)
- 4 Équation de Poisson
- 5 Résultats

Principe général

Objectif

L'algorithme HHL permet la résolution de systèmes linéaires sur un ordinateur quantique. Plus précisément, on souhaite résoudre l'équation $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, où A est une matrice hermitienne de $\mathcal{M}_N(\mathbb{C})$, et $\mathbf{x}, \mathbf{b} \in \mathbb{C}^N$.

Principe général

Objectif

L'algorithme HHL permet la résolution de systèmes linéaires sur un ordinateur quantique. Plus précisément, on souhaite résoudre l'équation $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, où A est une matrice hermitienne de $\mathcal{M}_N(\mathbb{C})$, et $\mathbf{x}, \mathbf{b} \in \mathbb{C}^N$.

Si A n'est pas hermitienne, il suffit de considérer la matrice

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} 0 & A \\ A^\dagger & 0 \end{pmatrix}$$

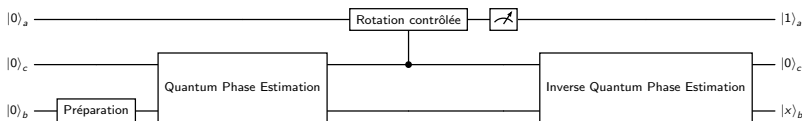
Principe général

Objectif

L'algorithme HHL permet la résolution de systèmes linéaires sur un ordinateur quantique. Plus précisément, on souhaite résoudre l'équation $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$, où A est une matrice hermitienne de $\mathcal{M}_N(\mathbb{C})$, et $\mathbf{x}, \mathbf{b} \in \mathbb{C}^N$.

Si A n'est pas hermitienne, il suffit de considérer la matrice

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} 0 & A \\ A^\dagger & 0 \end{pmatrix}$$



Les estimations de phase quantiques utilisent la transformée de Fourier quantique (QFT).

Quantum Fourier Transform (QFT)

Définition

La transformée de Fourier quantique d'un vecteur $|j\rangle$ de la base est définie par

$$U_{FT}|j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k \in [N]} e^{i2\pi \frac{kj}{N}} |k\rangle, N = 2^n$$

On utilise pour cela la représentation binaire des entiers j et k . On note ainsi $k = (k_{n-1} \dots k_0)$ et $j = (j_{n-1} \dots j_0)$ avec $k_i, j_i \in \{0, 1\}$. C'est-à-dire

$$k = 2^{n-1}k_{n-1} + \dots + 2^0k_0 \text{ et } j = 2^{n-1}j_{n-1} + \dots + 2^0j_0$$

Transformée de Fourier quantique d'un vecteur de base

$$U_{FT}|j\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi(\cdot j_0)}|1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi(\cdot j_1 j_0)}|1\rangle) \dots \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi(\cdot j_{n-1} \dots j_0)}|1\rangle)$$

Il reste maintenant à implémenter le circuit quantique.

Quantum Fourier Transform (QFT)

Rotation contrôlée

La fonction $|0\rangle|j\rangle \mapsto \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi(\cdot j_{n-1} \dots j_0)}|1\rangle)|j\rangle$ est une rotation contrôlée. On peut l'implémenter à l'aide des portes de rotation R_j définies par

$$R_j = R_z(\pi/2^{j-1}), \text{ avec } R_z(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{pmatrix}$$

Passons à l'implémentation du circuit en lui même. Commençons avec $n = 1$. Dans ce cas, on cherche une porte quantique qui transforme $|j_0\rangle$ en

$U_{\text{FT}}^{(n=1)}|j_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{i2\pi(\cdot j_0)}|1\rangle)$. Notons que $(\cdot j_0)$ représente $\frac{j_0}{2}$. Ainsi,

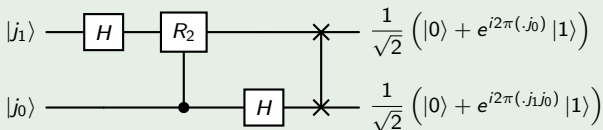
$$U_{\text{FT}}^{(n=1)}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), \quad U_{\text{FT}}^{(n=1)}|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$$

Cela correspond à la porte d'Hadamard. On en déduit finalement que $U_{\text{FT}}^{(n=1)} = H$

Quantum Fourier Transform (QFT)

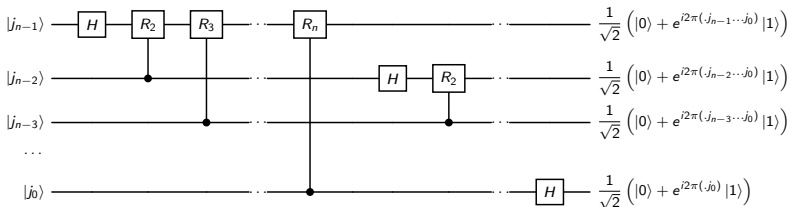
Intéressons nous maintenant au cas $n = 2$. On peut montrer que le circuit quantique correspondant $U_{QFT}^{(n=2)}$ est le suivant.

Circuit quantique pour $U_{QFT}^{(n=2)}$



Quantum Fourier Transform (QFT)

On peut généraliser ce schéma pour $n \in \mathbb{N}^*$ et obtenir le circuit suivant pour $U_{\text{FT}}^{(n)}$:



Transformée quantique de Fourier inverse

Notons que l'on peut également définir la transformée de Fourier inverse, qui sera utile pour la suite par

$$U_{\text{FT}}^\dagger(|k\rangle) = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{l=0}^{2^n-1} e^{-i2\pi \frac{l}{2^n} k} |l\rangle, \text{ avec } |k\rangle \text{ un vecteur de la base}$$

Quantum Phase Estimation (QPE)

Soit U un opérateur unitaire et $|\psi\rangle$ un de ses vecteurs propres. Les valeurs propres de U étant nécessairement de module 1, on a donc

$$U|\psi\rangle = e^{i2\pi\phi} |\psi\rangle, \quad \phi \in [0, 1[$$

Algorithme QPE

L'objectif de l'algorithme **QPE** est d'estimer la valeur de ϕ .

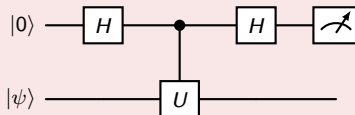
Il existe pour cela deux méthodes :

- 1 La méthode du test de Hadamard
- 2 La méthode de la transformée de Fourier quantique

Quantum Phase Estimation (QPE)

Pour résoudre ce problème avec les tests de Hadamard, il est nécessaire d'estimer séparément les parties réelle et imaginaire de ϕ .

Test de Hadamard pour l'estimation de $\text{Re}(\phi)$

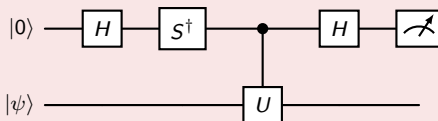


Cas réel On obtient en sortie l'état $\frac{1}{2}|0\rangle(|\psi\rangle + U|\psi\rangle) + \frac{1}{2}|1\rangle(|\psi\rangle - U|\psi\rangle)$. La probabilité de mesurer l'état $|0\rangle$ est alors

$$\mathbb{P}(\text{mes} = |0\rangle) = \frac{1}{2}(1 + \text{Re}\langle\psi|U|\psi\rangle) = \mathbb{P}_{\text{Re}}, \text{ avec } \text{Re}\langle\psi|U|\psi\rangle = \cos(2\pi\varphi)$$

Quantum Phase Estimation (QPE)

Test de Hadamard pour l'estimation de $\text{Im}(\phi)$



Cas imaginaire Cette fois ci la probabilité de mesurer $|0\rangle$ en sortie est

$$\mathbb{P}(\text{mes} = |0\rangle) = \frac{1}{2}(1 + \text{Im}\langle\psi|U|\psi\rangle) = \mathbb{P}_{\text{Im}}, \text{ avec } \text{Im}\langle\psi|U|\psi\rangle = \sin(2\pi\varphi)$$

On peut alors calculer la valeur de ϕ par

$$\varphi = \frac{1}{2\pi} \text{Arctan}\left(\frac{2\mathbb{P}_{\text{Im}} - 1}{2\mathbb{P}_{\text{Re}} - 1}\right)$$

Quantum Phase Estimation (QPE)

L'estimation de phase quantique est également possible en utilisant la transformée de Fourier quantique.

On définit l'opérateur

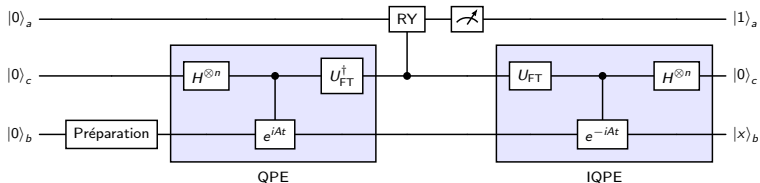
$$|0^d\rangle |\psi_0\rangle \longrightarrow \sum_{k'=0}^{2^d-1} \left(\frac{1}{2^d} \sum_{j=0}^{2^d-1} e^{i2\pi j \left(\phi - \frac{k'}{2^d} \right)} \right) |k'\rangle |\psi_0\rangle$$

Or, $\exists k \in \llbracket 0, 2^d - 1 \rrbracket \mid \phi = \frac{k}{2^d}$. On peut donc, en mesurant les qubits, obtenir l'information sur la phase. On obtient plus précisément l'état

$$|k\rangle |\psi_0\rangle = 2^d |\phi\rangle |\psi_0\rangle$$

les autres termes s'annulant par interférences destructives.

Implémentation de HHL

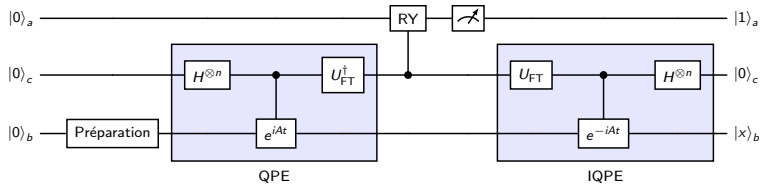


Étapes de calcul

L'algorithme HHL se divise en quatre phases principales :

- ① La préparation de l'état
- ② L'estimation de phase quantique (QPE)
- ③ La rotation du registre auxiliaire et la mesure
- ④ L'estimation de phase quantique inverse (IQPE)

Implémentation de HHL

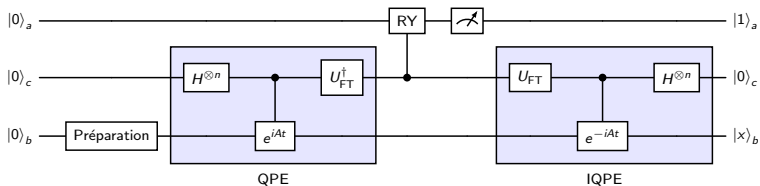


Ce circuit fait appel à trois registres distincts :

- Le registre a, pour *ancilla*, est un registre auxiliaire à un qubit.
- Le registre c, de taille n , stocke les valeurs des phases des valeurs propres de A après la QPE. Il fait référence à l'horloge (*clock*) dans la phase de rotation contrôlée. On pose $N = 2^n$.
- Le registre b, de taille n_b , stocke $|b\rangle$ au-début du circuit et sera progressivement modifié pour finalement accueillir $|x\rangle$ en sortie de circuit.

$|0\rangle_a$
 $|0\rangle_c$
 $|0\rangle_b$

Implémentation de HHL



On a montré que l'état final s'écrit

$$|\psi_g\rangle = |x\rangle_b |0\rangle_c |1\rangle_a$$

On peut alors retrouver x à une constante multiplicative (de normalisation) près.

Table des matières

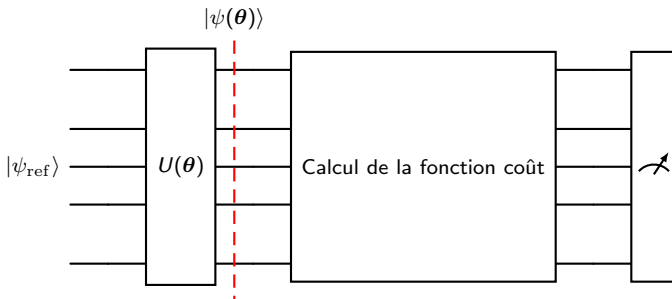
- 1 Introduction au calcul quantique
- 2 Algorithme Harrow-Hassidim-Lloyd (HHL)
- 3 **Algorithme Variational Quantum Linear Solver (VQLS)**
 - Algorithmes variationnels
 - Variational Quantum Eigensolver (VQE)
 - Application à la résolution de systèmes linéaires
 - Test de Hadamard et mesures naïves
 - Utilisation d'observables
- 4 Équation de Poisson
- 5 Résultats

Algorithmes variationnels

Un algorithme variationnel repose sur l'optimisation classique (descente de gradient par exemple) d'une quantité calculée par l'ordinateur quantique, appelée fonction coût.

Algorithmes variationnels

Un algorithme variationnel repose sur l'optimisation classique (descente de gradient par exemple) d'une quantité calculée par l'ordinateur quantique, appelée fonction coût.



- 1 Préparation de l'état de référence $|\psi_{\text{ref}}\rangle$.
- 2 Préparation de l'ansatz $|\psi(\theta)\rangle = U(\theta) |\psi_{\text{ref}}\rangle$.
- 3 Mesure de la fonction coût.
- 4 Optimisation des paramètres de θ .

On répète ces étapes jusqu'à atteindre le critère d'arrêt choisi.

Variational Quantum Eigensolver (VQE)

L'algorithme VQE est un algorithme variationnel de recherche de valeurs propres, visant à résoudre le problème

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle .$$

Variational Quantum Eigensolver (VQE)

L'algorithme VQE est un algorithme variationnel de recherche de valeurs propres, visant à résoudre le problème

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle .$$

Sa formulation la plus basique consiste à déterminer uniquement le fondamental E_0 et l'état associé.

Théorème d'énergie minimale

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \quad \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \geq E_0$$

Variational Quantum Eigensolver (VQE)

L'algorithme VQE est un algorithme variationnel de recherche de valeurs propres, visant à résoudre le problème

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle.$$

Sa formulation la plus basique consiste à déterminer uniquement le fondamental E_0 et l'état associé.

Théorème d'énergie minimale

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \quad \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \geq E_0$$

Fonction coût

$$E : \theta \in \mathbb{R}^n \mapsto \langle \psi(\theta) | \hat{H} | \psi(\theta) \rangle$$

Variational Quantum Eigensolver (VQE)

L'algorithme VQE est un algorithme variationnel de recherche de valeurs propres, visant à résoudre le problème

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle.$$

Sa formulation la plus basique consiste à déterminer uniquement le fondamental E_0 et l'état associé.

Théorème d'énergie minimale

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \quad \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \geq E_0$$

Fonction coût

$$E : \theta \in \mathbb{R}^n \mapsto \langle \psi(\theta) | \hat{H} | \psi(\theta) \rangle$$

Décomposition de $\hat{H}$ en chaînes de Pauli

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=1}^L h_{\alpha} P_{\alpha}$$

On peut donc réécrire la fonction coût

$$E(\theta) = \sum_{\alpha} h_{\alpha} \langle \psi(\theta) | P_{\alpha} | \psi(\theta) \rangle.$$

Variational Quantum Eigensolver (VQE)

L'algorithme VQE est un algorithme variationnel de recherche de valeurs propres, visant à résoudre le problème

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle.$$

Sa formulation la plus basique consiste à déterminer uniquement le fondamental E_0 et l'état associé.

Théorème d'énergie minimale

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \quad \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \geq E_0$$

Fonction coût

$$E : \theta \in \mathbb{R}^n \mapsto \langle \psi(\theta) | \hat{H} | \psi(\theta) \rangle$$

Décomposition de $\hat{H}$ en chaînes de Pauli

$$\hat{H} = \sum_{\alpha=1}^L h_{\alpha} P_{\alpha}$$

On peut donc réécrire la fonction coût

$$E(\theta) = \sum_{\alpha} h_{\alpha} \langle \psi(\theta) | P_{\alpha} | \psi(\theta) \rangle.$$

On transforme un état quantique de référence $|\psi_{\text{ref}}\rangle$ à l'aide de la porte multi-qubits $U(\theta)$. Puis, on mesure quantiquement la fonction coût $E(\theta) = \langle \psi(\theta) | \hat{H} | \psi(\theta) \rangle$, en utilisant la décomposition de l'hamiltonien en chaînes de Pauli. On optimise θ à l'aide d'une technique classique. Le minimum donne l'énergie fondamentale et l'état associé.

Application à la résolution de systèmes linéaires

$$\text{But : } Ax = b \longrightarrow \hat{H} |\psi(\theta)\rangle = E |\psi(\theta)\rangle$$

Définitions

- $|b\rangle = U_b |0\rangle^{\otimes n}$
- $|x(\theta)\rangle = U(\theta) |0\rangle^{\otimes n}$
- $|\psi(\theta)\rangle = A |x(\theta)\rangle$
- $\hat{H} = A^\dagger (I - |b\rangle \langle b|) A$

Application à la résolution de systèmes linéaires

$$\text{But : } Ax = b \longrightarrow \hat{H} |\psi(\theta)\rangle = E |\psi(\theta)\rangle$$

Définitions

- $|b\rangle = U_b |0\rangle^{\otimes n}$
- $|x(\theta)\rangle = U(\theta) |0\rangle^{\otimes n}$
- $|\psi(\theta)\rangle = A |x(\theta)\rangle$
- $\hat{H} = A^\dagger (I - |b\rangle \langle b|) A$

Fonction coût

$$C(\theta) := \langle x(\theta) | \hat{H} | x(\theta) \rangle = \langle \psi(\theta) | \psi(\theta) \rangle - |\langle b | \psi(\theta) \rangle|^2$$

Application à la résolution de systèmes linéaires

But : $Ax = b \longrightarrow \hat{H}|\psi(\theta)\rangle = E|\psi(\theta)\rangle$

Définitions

- $|b\rangle = U_b|0\rangle^{\otimes n}$
- $|x(\theta)\rangle = U(\theta)|0\rangle^{\otimes n}$
- $|\psi(\theta)\rangle = A|x(\theta)\rangle$
- $\hat{H} = A^\dagger(I - |b\rangle\langle b|)A$

Fonction coût

$$C(\theta) := \langle x(\theta) | \hat{H} | x(\theta) \rangle = \langle \psi(\theta) | \psi(\theta) \rangle - |\langle b | \psi(\theta) \rangle|^2$$

En réalité, on mesure plutôt une fonction coût normalisée

$$C(\theta) := \frac{C(\theta)}{\langle \psi(\theta) | \psi(\theta) \rangle} = 1 - \frac{|\langle b | \psi(\theta) \rangle|^2}{\langle \psi(\theta) | \psi(\theta) \rangle}$$

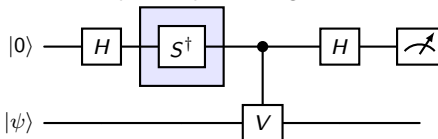
Dans tous les cas, on a besoin de mesurer deux quantités :

- L'overlap $|\langle b | \psi(\theta) \rangle|^2$;
- $\langle \psi(\theta) | \psi(\theta) \rangle$.

Test de Hadamard et mesures naïves

Le test de Hadamard est un moyen d'estimer $\langle \psi | V | \psi \rangle$ où V est supposé unitaire.

Seulement pour la partie imaginaire



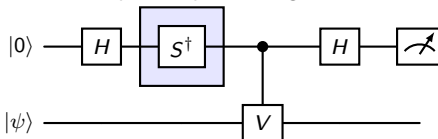
Test de Hadamard

$$\langle \psi | V | \psi \rangle = 2p_0 - 1 + i(2p'_0 - 1)$$

Test de Hadamard et mesures naïves

Le test de Hadamard est un moyen d'estimer $\langle \psi | V | \psi \rangle$ où V est supposé unitaire.

Seulement pour la partie imaginaire



Test de Hadamard

$$\langle \psi | V | \psi \rangle = 2p_0 - 1 + i(2p'_0 - 1)$$

La décomposition de A en chaînes de Pauli : $A = \sum_{l=1}^L c_l A_l$ permet d'écrire

- $$\langle \psi(\theta) | \psi(\theta) \rangle = \sum_{l=1}^L \sum_{p=1}^L c_l c_p^\dagger \langle 0^{\otimes n} | U^\dagger(\theta) A_p^\dagger A_l U(\theta) | 0^{\otimes n} \rangle$$
- $$|\langle b | \psi(\theta) \rangle|^2 = \sum_{l=1}^L \sum_{p=1}^L c_l c_p^* \langle 0^{\otimes n} | U_b^\dagger A_l U(\theta) | 0^{\otimes n} \rangle \langle 0^{\otimes n} | U(\theta)^\dagger A_p^\dagger U_b | 0^{\otimes n} \rangle$$

Utilisation d'observables

Comme A est symétrique réelle, on peut s'éviter les mesures fastidieuses présentées ci-avant et utiliser des observables.

Calcul simplifié de $\langle \psi(\theta) | \psi(\theta) \rangle$

$$\langle \psi(\theta) | \psi(\theta) \rangle = \langle x(\theta) | A^\dagger A | x(\theta) \rangle = \langle x(\theta) | A^2 | x(\theta) \rangle$$

La quantité intéressante est la valeur moyenne de l'observable A^2 dans l'état $|x(\theta)\rangle$.

Utilisation d'observables

Comme A est symétrique réelle, on peut s'éviter les mesures fastidieuses présentées ci-avant et utiliser des observables.

Calcul simplifié de $\langle \psi(\theta) | \psi(\theta) \rangle$

$$\langle \psi(\theta) | \psi(\theta) \rangle = \langle x(\theta) | A^\dagger A | x(\theta) \rangle = \langle x(\theta) | A^2 | x(\theta) \rangle$$

La quantité intéressante est la valeur moyenne de l'observable A^2 dans l'état $|x(\theta)\rangle$.

Calcul simplifié de $|\langle b | \psi(\theta) \rangle|^2$

$$\langle b | \psi(\theta) \rangle = \langle b | A | x(\theta) \rangle = \langle bx(\theta) | X \otimes A | bx(\theta) \rangle$$

$$\text{avec } |bx(\theta)\rangle := \frac{|0\rangle |b\rangle + |1\rangle |x(\theta)\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Là encore, on se ramène au calcul de la valeur moyenne de l'observable $X \otimes A$ dans l'état $|bx(\theta)\rangle$.

Ces techniques nécessitent les décompositions en chaînes de Pauli de A^2 et $X \otimes A$.

Table des matières

- 1 Introduction au calcul quantique
- 2 Algorithme Harrow-Hassidim-Lloyd (HHL)
- 3 Algorithme Variational Quantum Linear Solver (VQLS)
- 4 Équation de Poisson
 - Discrétisation
 - Diagonalisation de A
 - Décomposition en chaînes de Pauli de A
 - Décomposition en chaînes de Pauli de A^2
- 5 Résultats

Discretisation

On s'attache à la résolution de l'équation de Poisson sur l'intervalle $[0, 1]$:

$$-\Delta u = f.$$

Discretisation

On s'attache à la résolution de l'équation de Poisson sur l'intervalle $[0, 1]$:

$$-\Delta u = f.$$

On cherche une forme matricielle de ce problème. On utilise pour cela la méthode des différences finies. On discrétise le segment $[0, 1]$ en N points équidistants

$(a_k)_{k \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket}$. On définit les fonctions $x = (u(a_k))_{k \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket}$ et

$b = (f(a_k))_{k \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket}$. Pour $h \ll 1$, on peut approcher $x_k'' \approx \frac{x_{k+1} - 2x_k + x_{k-1}}{h^2}$.

Discrétisation

On s'attache à la résolution de l'équation de Poisson sur l'intervalle $[0, 1]$:

$$-\Delta u = f.$$

On cherche une forme matricielle de ce problème. On utilise pour cela la méthode des différences finies. On discrétise le segment $[0, 1]$ en N points équidistants

$(a_k)_{k \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket}$. On définit les fonctions $\mathbf{x} = (u(a_k))_{k \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket}$ et

$\mathbf{b} = (f(a_k))_{k \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket}$. Pour $h \ll 1$, on peut approcher $x_k'' \approx \frac{x_{k+1} - 2x_k + x_{k-1}}{h^2}$.

Discrétisation de l'équation de Poisson

$$-\Delta u = f \iff A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad A = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ -1 & 2 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & 2 & -1 \\ 0 & \cdots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

Diagonalisation de A

L'algorithme HHL nécessite la décomposition spectrale de A .

La matrice A étant symétrique réelle, elle est diagonalisable en vertu du théorème spectral.

Diagonalisation de A

L'algorithme HHL nécessite la décomposition spectrale de A .

La matrice A étant symétrique réelle, elle est diagonalisable en vertu du théorème spectral.

Valeurs propres de A

$$\lambda_k = \frac{2}{h^2} \left(1 + \cos \left(\frac{k\pi}{N+1} \right) \right), \quad k \in \llbracket 1, N \rrbracket$$

Vecteurs propres de A

$$\mathbf{v}_k = \sum_{j=1}^N \sin \left(\frac{jk\pi}{N+1} \right) e^{-ij} \mathbf{e}_j, \quad k \in \llbracket 1, N \rrbracket$$

Décomposition en chaînes de Pauli de A

Pour l'exécution de l'algorithme VQLS, on utilise l'observable $X \otimes A$. On a donc besoin de la décomposition en chaînes de Pauli de A .

Définition

On cherche la décomposition en chaînes de Pauli de A sous la forme

$$A = \sum_{l=1}^L c_l A_l$$

où $c_l \in \mathbb{C}$ et A_l est un produit fini d'opérateurs de Pauli (I, X, Y, Z).

On raisonne par récurrence. On pose $N = 2^m$.

$m = 1$

$$A = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} = A^{(1)}$$

La décomposition en chaîne de Pauli s'écrit alors $A^{(1)} = 2I - X$. On a donc $c_1 = 2, A_1 = I, c_2 = -1$ et $A_2 = X$.

Décomposition en chaînes de Pauli de A

Définition

On cherche la décomposition en chaînes de Pauli de A sous la forme

$$A = \sum_{l=1}^L c_l A_l$$

où $c_l \in \mathbb{C}$ et A_l est un produit fini d'opérateurs de Pauli (I, X, Y, Z).

On raisonne par récurrence. On pose $N = 2^m$.

$m = 2$

$$A = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} = A^{(2)}$$

Pour simplifier les notations, on pose $\sigma_+ = \frac{X + iY}{2}$ et $\sigma_- = \frac{X - iY}{2}$. On obtient

$$A^{(2)} = I \otimes A^{(1)} - \sigma_+ \otimes \sigma_- - \sigma_- \otimes \sigma_+ = 2I \otimes I - I \otimes X - \frac{1}{2}X \otimes X - \frac{1}{2}Y \otimes Y.$$

Décomposition en chaînes de Pauli de A

Définition

On cherche la décomposition en chaînes de Pauli de A sous la forme

$$A = \sum_{l=1}^L c_l A_l$$

où $c_l \in \mathbb{C}$ et A_l est un produit fini d'opérateurs de Pauli (I, X, Y, Z).

On raisonne par récurrence. On pose $N = 2^m$.

$m \in \mathbb{N}^*$

On peut montrer que

$$A^{(m)} = I \otimes A^{(m-1)} - \sigma_+ \otimes \sigma_-^{\otimes m-1} - \sigma_- \otimes \sigma_+^{\otimes m-1}$$

Décomposition en chaînes de Pauli de A^2

La matrice A^2 s'écrit

$$A^2 = \frac{1}{h^4} \begin{pmatrix} 5 & -4 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ -4 & 6 & -4 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 1 & -4 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & -4 & 1 \\ \vdots & \ddots & \ddots & -4 & 6 & -4 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & -4 & 5 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{h^4} \underbrace{\begin{pmatrix} 6 & -4 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ -4 & 6 & -4 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 1 & -4 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & -4 & 1 \\ \vdots & \ddots & \ddots & -4 & 6 & -4 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & -4 & 6 \end{pmatrix}}_B - \frac{1}{h^4} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}}_C$$

Décomposition en chaînes de Pauli de A^2

On a aussi besoin de l'observable A^2 , et donc de sa décomposition en chaînes de Pauli.
 On a $\forall m \in \mathbb{N}^*$,

$$A^{2(m)} = \frac{1}{h^4} B^{(m)} - \frac{1}{h^4} C^{(m)}$$

Décomposition de A^2

$$B^{(m)} = I \otimes B^{(m-1)} + \sigma_- \otimes \sigma_+^{m-2} \otimes (I - 4\sigma_+) + \sigma_+ \otimes \sigma_-^{m-2} \otimes (I - 4\sigma_-)$$

et

$$C^{(m)} = (\sigma_+ \sigma_-)^{\otimes m} + (\sigma_- \sigma_+)^{\otimes m}$$

Table des matières

- 1 Introduction au calcul quantique
- 2 Algorithme Harrow-Hassidim-Lloyd (HHL)
- 3 Algorithme Variational Quantum Linear Solver (VQLS)
- 4 Équation de Poisson
- 5 Résultats**
 - Contexte
 - $f : x \mapsto x$
 - $f : x \mapsto \sin(x)$
 - $f : x \mapsto e^{-x^2}$
 - Conclusion

Contexte

Points d'attention

- Résultats pour l'algorithme HHL seulement
- Algorithme VQLS complètement implémenté
- Problèmes lors de la phase d'optimisation

Contexte

Points d'attention

- Résultats pour l'algorithme HHL seulement
- Algorithme VQLS complètement implémenté
- Problèmes lors de la phase d'optimisation

Pour des questions de puissance de calcul, nous nous sommes limités au cas $n = 3$, ce qui correspond à un découpage du segment $[0, 1]$ en $2^n = 8$ éléments. Les résultats qui suivent sont donc la solution approchée de l'équation

$$-\Delta u = f$$

d'inconnue u par la méthode quantique HHL, pour différentes fonctions f :

- 1 $f : x \mapsto x$
- 2 $f : x \mapsto \sin(x)$
- 3 $f : x \mapsto e^{-x^2}$

$$f : x \mapsto x$$

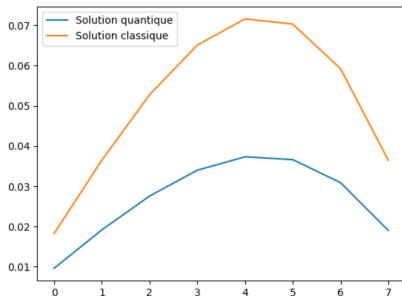


Figure: Solution naïve

$$f : x \mapsto x$$

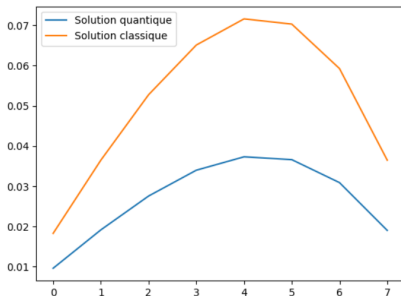


Figure: Solution naïve

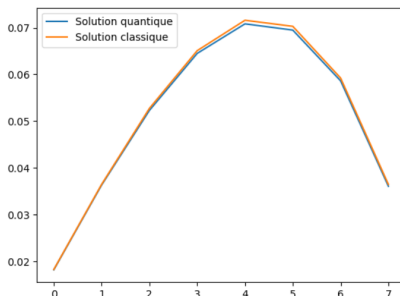


Figure: Solution ajustée

À première vue, les résultats ne sont pas satisfaisants. Or, nous avons vu que l'algorithme HHL donne une solution proportionnelle à la solution exacte. En ajoutant le coefficient de proportionnalité approprié, nous obtenons une solution concluante.

$$f : x \mapsto \sin(x)$$

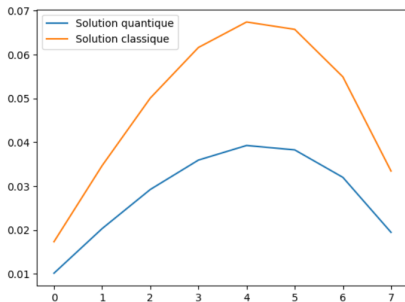


Figure: Solution naïve

$$f : x \mapsto \sin(x)$$

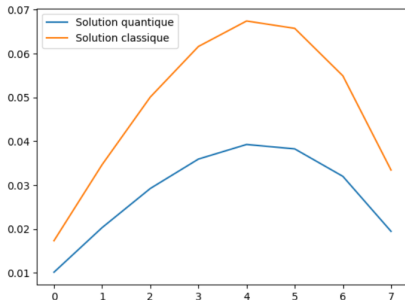


Figure: Solution naïve

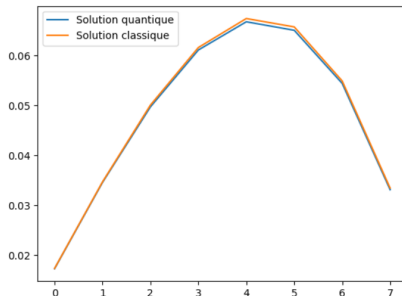


Figure: Solution ajustée

Là encore, la solution ajustée est pleinement satisfaisante.

$$f : x \mapsto e^{-x^2}$$

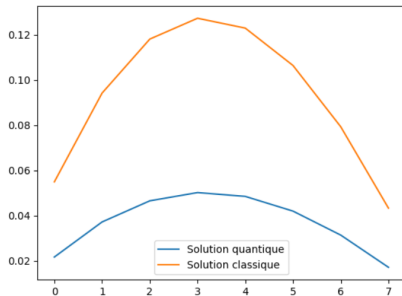


Figure: Solution naïve

$$f : x \mapsto e^{-x^2}$$

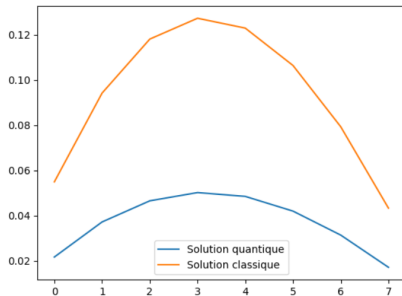


Figure: Solution naïve

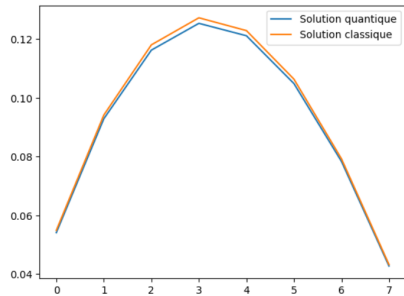


Figure: Solution ajustée

Ce dernier test permet de mettre en évidence l'intérêt des résolutions quantiques, permettant de trouver rapidement des solutions difficiles à obtenir analytiquement.

Conclusion

Outils quantiques

- Test de Hadamard
- *Swap test*
- Transformée de Fourier quantique
- Estimation de phase quantique

Conclusion

Outils quantiques

- Test de Hadamard
- *Swap test*
- Transformée de Fourier quantique
- Estimation de phase quantique

Outils mathématiques

- Méthode des différences finies
- Diagonalisation de A
- Décomposition en chaînes de Pauli

Conclusion

Outils quantiques

- Test de Hadamard
- *Swap test*
- Transformée de Fourier quantique
- Estimation de phase quantique

Outils mathématiques

- Méthode des différences finies
- Diagonalisation de A
- Décomposition en chaînes de Pauli

Algorithmes

- Algorithme Harrow-Hassidim-Lloyd (implémenté sur Qiskit de IBM)
- Algorithme Variational Quantum Linear Solver (implémenté sur QLM de Atos)

Conclusion

Outils quantiques

- Test de Hadamard
- *Swap test*
- Transformée de Fourier quantique
- Estimation de phase quantique

Outils mathématiques

- Méthode des différences finies
- Diagonalisation de A
- Décomposition en chaînes de Pauli

Algorithmes

- Algorithme Harrow-Hassidim-Lloyd (implémenté sur Qiskit de IBM)
- Algorithme Variational Quantum Linear Solver (implémenté sur QLM de Atos)

Ouvertures :

- Obtenir des résultats avec VQLS
- Généraliser à u et f définies sur $\mathbb{R}^q$
- Généraliser à $n > 3$
- Ajouter du bruit quantique
- Étudier d'autres équations différentielles

Conclusion

Outils quantiques

- Test de Hadamard
- *Swap test*
- Transformée de Fourier quantique
- Estimation de phase quantique

Outils mathématiques

- Méthode des différences finies
- Diagonalisation de A
- Décomposition en chaînes de Pauli

Algorithmes

- Algorithme Harrow-Hassidim-Lloyd (implémenté sur Qiskit de IBM)
- Algorithme Variational Quantum Linear Solver (implémenté sur QLM de Atos)

Ouvertures :

- Obtenir des résultats avec VQLS
- Généraliser à u et f définies sur $\mathbb{R}^q$
- Généraliser à $n > 3$
- Ajouter du bruit quantique
- Étudier d'autres équations différentielles

Merci pour votre attention !
Merci à Éric & Alicia.