

Hybridní (kvantově-klasické) variační algoritmy

Libor Veis

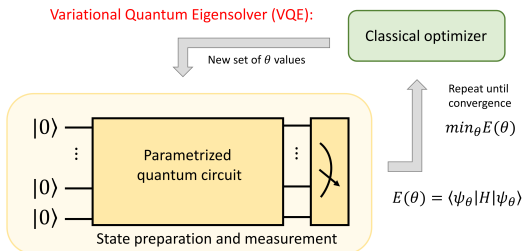
- 1 Variational Quantum Eigensolver (VQE)
- 2 Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA)
- 3 Variational Quantum Classifier (VQC)

Variational Quantum Eigensolver (VQE)

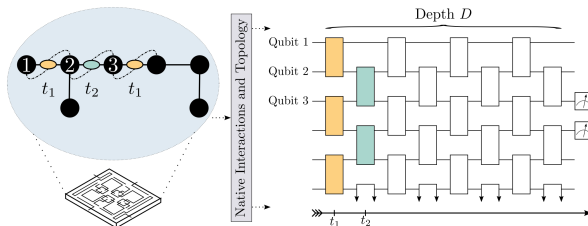
- Phase estimation algorithm (PEA) umožňuje získat vlastní hodnoty ze spektra elektronického Hamiltoniánu s *libovolnou přesností*, vyžaduje však kvůli délce kvantových obvodů *fault-tolerant quantum computers*.
- Slibnou alternativou pro NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum) zařízení je Variational Quantum Eigensolver (VQE), který kombinuje přednosti kvantových a klasických počítačů.
- Využívá variační princip:

$$E = \min_{\vec{\theta}} \langle \Psi(\vec{\theta}) | H | \Psi(\vec{\theta}) \rangle \quad (1)$$

- Příprava stavu $|\Psi(\vec{\theta})\rangle$, měření $\langle \Psi(\vec{\theta}) | H | \Psi(\vec{\theta}) \rangle$ na kvantovém počítači
- Optimalizace $\vec{\theta}$ na klasickém počítači
- Využívá exponenciální kapacitu kvantových registrů, avšak počet parametrů $\vec{\theta}$ musí být *polynomiální!*



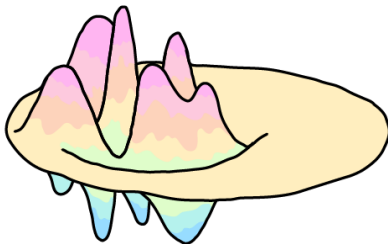
- Zmírnění vliv šumu hardwaru pomocí hradel, která jsou přirozená pro konkrétní architekturu/topologii.



- Není tedy problém specifický - což může být výhoda: použití v kvantové chemii, či kvantovém strojovém učení, ale také nevýhoda - Barren plateaus.

Barren plateaus (BPs)

- Barren plateaus (BPs) jsou ploché oblasti na hyperpovrchu, které se vyznačují exponenciálně mizícími gradienty v závislosti na velikosti problému $\Rightarrow$ **způsobuje neefektivitu VQA!**



- BPs jsou ve své podstatě důsledkem prokletí dimenzionality!
- Typicky problematické jsou hluboké HEA s velkou expresivitou.
- Na druhou stranu bylo ukázáno, že příliš mělké obvody mohou vést k *falešným lokálním minimům*.
- Jednou z osvědčených strategií je zaměřit se na oblasti s velkými gradienty, jako v ADAPTivních schématech chemicky inspirovaných ansatzů.

- Chemicky inspirované rozvoje jsou téměř výhradně založeny na teorii Unitárních Coupled Clusters (UCC):

- Metody UCC nelze implementovat *efektivně* na klasickém počítači $\Rightarrow$ potenciální kvantová výhoda:

$$e^{-T} H e^T = H + [H, T] + \frac{1}{2} [[H, T], T] + \frac{1}{3!} [[[H, T], T], T] + \frac{1}{4!} [[[[H, T], T], T], T]$$

$$e^{T^\dagger - T} H e^{T - T^\dagger} \Rightarrow \text{nekončící řada}$$

- Je známo, že UCCSD překonává CCSD, zejména u silně korelovaných systémů.

$$\text{UCCSD: } \hat{U}(\vec{\theta}) = e^{\hat{T} - \hat{T}^\dagger}, \quad \hat{T} = \hat{T}_1 + \hat{T}_2$$

$$\text{ADAPT: } \hat{U}(\vec{\theta}) = e^{\theta_k \hat{\tau}_k} \dots e^{\theta_2 \hat{\tau}_2} e^{\theta_1 \hat{\tau}_1}, \quad \hat{\tau}_i = -\hat{\tau}_i^\dagger \in \{\hat{T}_1, \hat{T}_2\}$$

$$\text{qubit-ADAPT: } \hat{U}(\vec{\theta}) = e^{\theta_k \hat{\tau}_k} \dots e^{\theta_2 \hat{\tau}_2} e^{\theta_1 \hat{\tau}_1}, \quad \hat{\tau}_i = \hat{P} = i \prod_j p_j, p_j \in \{X, Y, Z\}$$

- Přístup qubit-ADAPT vede k úsporám řádově v počtu CNOT hradel!

- Reprezentace Hamiltoniánu ve druhém kvantování $\xrightarrow{\text{JW nebo BW mapování}}$ lineární kombinace součinů Pauliho operátorů

$$E(\vec{\theta}) = \sum_j h_j \langle \Psi(\vec{\theta}) | \prod_i \sigma_i^j | \Psi(\vec{\theta}) \rangle \quad \sigma_i^j \in \{I, X, Y, Z\}$$

→ obsahuje 1-elektronové a 2-elektronové integrály

- Každé měření vyžaduje nově připravený stav $\Psi(\vec{\theta})$.
- Klasická optimalizace parametrů $\vec{\theta}$: s gradientem nebo bez něj.
- VQE vyměňuje dlouhé koherentní obvody PEA za krátké obvody a velké množství měření.
- Celkové škálování je opět nízký polynom v M (pokročilé metody pro redukci počtu měření, stále se zlepšují).

Quantum Error mitigation (QEM)

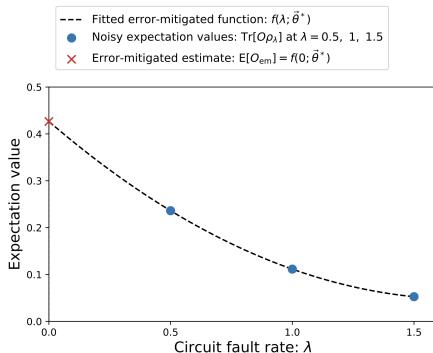
- Vzhledem k tomu, že jsme stále poměrně daleko od výpočtů na kvantových počítačích odolných vůči chybám (Fault Tolerant QC), se v éře NISQ zaměřujeme spíše na zmírňování chyb než na jejich úplné odstranění.
- QEM – algoritmické schéma, které snižuje zkreslení způsobené šumem ve střední hodnotě (např. energie) pomocí postprocessingu.
- Bylo navrženo několik přístupů k QEM, pravděpodobně nejjednodušší je *extrapolace k nulovému šumu* (Zero-noise extrapolation):

- ▶ Myšlenkou je provést experimenty s různými úrovněmi šumu a poté pomocí klasické polynomiální extrapolace odhadnout výsledek v režimu nulového šumu.

$U \dots$ celý kvantový obvod

- ▶ Zvýšení šumu:

$$U(U^{-1}U)^n$$



Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA)

- Ve skutečnosti se jedná o speciální případ VQE navržený pro kombinatorické optimalizační problémy.
- Hledá přibližná řešení instancí kvadratické neomezené binární optimalizace (QUBO)

$$\min_x \left(f_c(x) = x^T Q x + c^T x \right) \quad x \in \{0, 1\}^n, \quad Q \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad c \in \mathbb{R}^n$$

- NP-těžké problémy lze převést na instance QUBO
- Pokud vezmeme v úvahu

$$Z|x\rangle = 1 - 2x|x\rangle \quad \Rightarrow \quad \frac{1-Z}{2}|x\rangle = x|x\rangle$$

a dosadíme $\frac{1-Z}{2}$ místo x do $f_c(x)$, dostaneme Hamiltonián, který vrací hodnoty $f_c(x)$ jako své vlastní hodnoty a má tvar Isingova modelu:

$$H_c = \sum_{ij} J_{ij} Z_i Z_j + \sum_i h_i Z_i, \quad J_{ij}(Q_{ij}), \quad h_i(c_i, Q_{ij})$$

Původní minimalizační problém byl převeden na problém základního stavu Hamiltoniánu H_c . Lze použít optimalizaci typu VQE!

- Myšlenkou je začít s počátečním (jednoduchým) Hamiltoniánem a jeho známým základním stavem a pomalu měnit Hamiltonián:

$$H(t) = (1 - t/T)H_{\text{init}} + (t/T)H_{\text{exact}} \quad t: 0 \longrightarrow T$$

- Podle adiabatické věty má systém tendenci zůstat v základním stavu, pokud se změna děje dostatečně pomalu (dostatečně velké T).
- Lze simulovat na digitálním kvantovém počítači jako diskrétní kvantový časový vývoj:

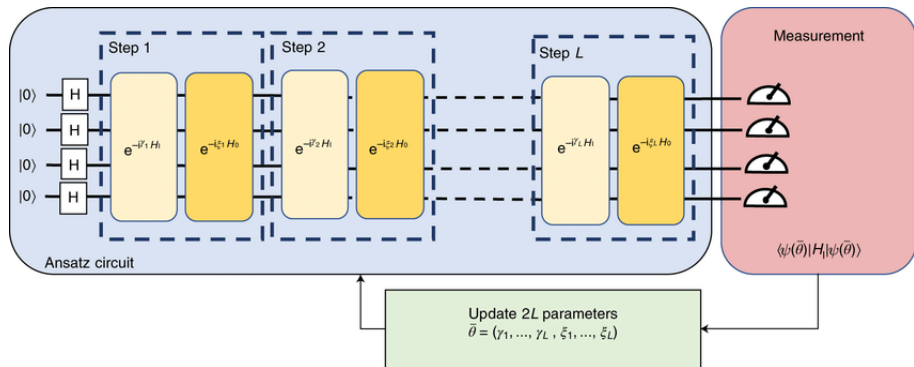
$$|\psi(t)\rangle = e^{-iH(t)\delta t}|\psi(0)\rangle$$

- Počáteční Hamiltonián se volí jako součet Pauliho X matic, protože jeho vlastní stav $\left(\frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \dots \otimes \frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}}\right)$ lze snadno připravit pomocí Walsh-Hadamardovy transformace.

$$H_{\text{init}} = \sum_i X_i \quad X|+\rangle = |+\rangle, \text{ kde } |+\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}$$

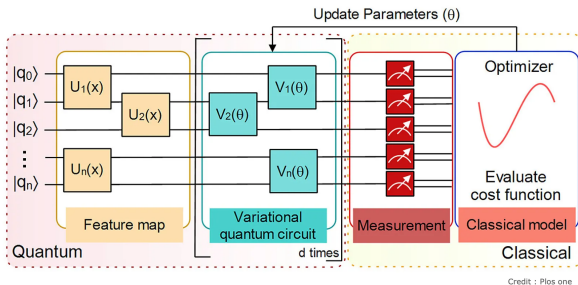
- Protože H_{init} a $H_{\text{exact}} = H_C$ spolu nekomutují, je třeba použít Trotterovu aproximaci:

$$e^{-i(H_1+H_2)\delta t} \approx \left(e^{-iH_1\delta t/n}e^{-iH_2\delta t/n}\right)^n$$



Variational Quantum Classifier (VQC)

- Patří do kategorie supervised Quantum Machine Learning QML().
- Konceptně je velmi podobný VQE, hlavní rozdíl: VQE je řízený problémem, zatímco VQC/QML jsou řízené daty. V obou případech se parametrizovaný kvantový obvod optimalizuje pomocí klasické optimalizace.



Credit : Plos one

- Na rozdíl od VQE, kde minimalizujeme cost funkci $E(\vec{\theta}) = \langle \Psi(\vec{\theta}) | H | \Psi(\vec{\theta}) \rangle$, ve VQC se minimalizuje loss funkce:

$$L(\vec{\theta}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\text{pred}_i(\vec{\theta}) - \text{label}_i)^2$$
$$\Rightarrow \frac{\partial L(\vec{\theta})}{\partial \theta_i} \Rightarrow \text{Nová sada parametrů } (\vec{\theta})$$

Variational Quantum Classifier (VQC)

- Klasická vstupní data mohou být zakódována:

- 1 Do stavu qubitů. Například binární data mohou být přímo reprezentována výpočetními báзовými stavy:

$$x = 0101 \dots \rightarrow |\Psi\rangle = |0101 \dots\rangle$$

- 2 Reálné vektory mohou být zakódovány pomocí amplitud výpočetních báзовých stavů:

$$\vec{x} \rightarrow |\Psi\rangle = \sum_i x_i |i\rangle \quad |i\rangle \in \{|0\rangle, |1\rangle\}^{\otimes n}$$

- Snadno realizovatelným ukázkovým příkladem je VQC aplikovaný na problém parity dat, tj. emulace paritní funkce:

$$f : x \in \{0, 1\}^{\otimes n} \rightarrow y = 1(\text{lichý počet jedniček v } x)/0(\text{jinak})$$

- Všimněte si, že jsme již viděli přesný kvantový obvod, který tuto funkci realizuje:

