

UN ANSATZ INSPIRÉ DU CONTRÔLE OPTIMAL QUANTIQUE POUR LES ALGORITHMES QUANTIQUES VARIATIONNELS

Un algorithme hybride quantique-classique capable d'exploiter la puissance de calcul des petits processeurs quantiques et de s'adapter à des systèmes plus importants.

Contexte

Les progrès technologiques dans le domaine du calcul haute performance ont permis d'innombrables découvertes scientifiques et percées techniques depuis l'aube de l'ère informatique. Ces progrès sont en grande partie le résultat de la miniaturisation des processeurs et de la disponibilité d'une plus grande puissance de calcul, comme le prédit la loi de Moore. Cependant, nous approchons rapidement des limites de la miniaturisation des transistors et la nécessité de trouver des technologies alternatives est cruciale pour la poursuite des progrès.

En exploitant les propriétés intrinsèques de la mécanique quantique, les ordinateurs quantiques apporteront des améliorations exponentielles pour résoudre des problèmes que les ordinateurs classiques ne peuvent pas résoudre, ou résoudre efficacement, comme l'optimisation (vendeur itinérant, apprentissage automatique), la factorisation des nombres premiers, la simulation de la matière (matériaux, molécules et protéines) et la modélisation des marchés financiers.

L'apparition de nouveaux dispositifs quantiques de plus en plus puissants incite la recherche à trouver des algorithmes de plus en plus apte à exploiter la puissance de calcul des petits processeurs quantiques. Des algorithmes hybrides quantiques-classiques ont été introduits à cette fin. Connus sous le nom d'algorithmes quantiques variationnels (AQV), ces méthodes n'utilisent un ordinateur quantique que pour la partie la plus critique d'un programme, tandis qu'un coprocesseur classique plus robuste sert d'optimiseur qui fonctionne en boucle avec le dispositif quantique - voir la figure 1. Ici, le terme "variationnel" fait référence au fait que des paramètres libres de la routine sont ajustés de manière itérative pour trouver la solution, et que cette solution est la valeur la plus basse que l'algorithme puisse trouver. La solution est donc désignée comme l'état fondamental du problème. Les AQV exploitent l'utilisation d'un circuit variationnel, l'*Ansatz*, qui doit être exécuté sur l'ordinateur quantique.

S'il est encore trop tôt pour prédire quel domaine sera le plus touché par les futures générations de processeurs quantiques, la simulation de la matière quantique présente un intérêt particulier pour les chercheurs dans ce domaine. Fait important, cette dernière a le potentiel de révolutionner des domaines tels que la médecine (conception de médicaments), l'ingénierie (conception de matériaux), l'agriculture (engrais) et la chimie (conception de procédés chimiques). Bien que les dispositifs quantiques actuels soient encore de taille modeste et sujets au bruit ambiant, nous nous attendons à ce que les futures générations de processeurs quantiques de taille et de qualité croissantes soient finalement capables de bouleverser l'état de l'art en matière de calcul classique.

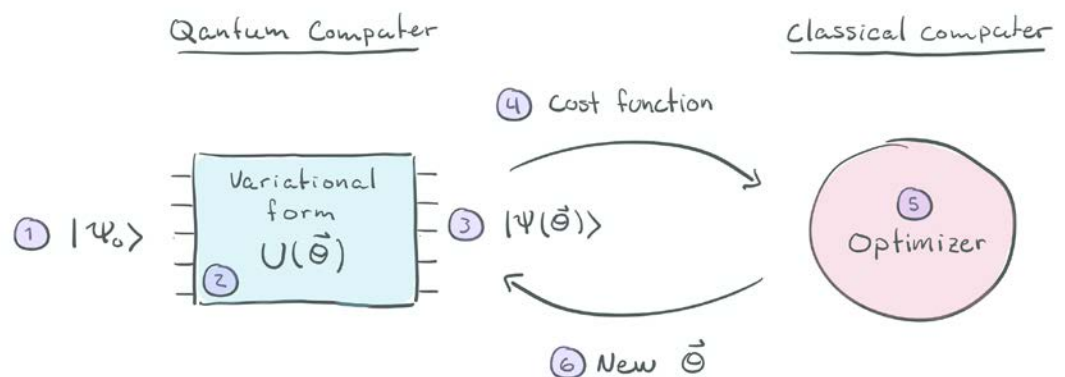


Figure 1 - Schéma d'un algorithme quantique variationnel. - Source : Université de Sherbrooke.

Description

Cette invention concerne l'état de l'art des *ansatz* d'algorithmes quantiques variationnels pour la physique et la chimie. Nous introduisons un nouvel *ansatz* variationnel inspiré des techniques de la théorie du contrôle optimal quantique. Cela conduit à une recherche variationnelle qui brise les symétries de l'hamiltonien du problème, permettant une plus grande flexibilité dans la préparation des états. Nous appelons cet *ansatz* "Quantum-Optimal-Control-inspired Ansatz", ou QOCA. Nous comparons le QOCA à l'*ansatz* efficace du point de vue matériel (HEA) et à l'*ansatz* du hamiltonien variationnel (AHV) sur une petite instance d'un problème extrêmement difficile de la physique de la matière condensée, le modèle de Fermi-Hubbard. Nous constatons que dans certains cas, HEA et VHA ne parviennent pas à converger vers l'état fondamental, alors que QOCA accomplit cette tâche en utilisant moins de paramètres variationnels. En raison de la grande flexibilité de QOCA, ce travail ouvre la porte à une multitude d'applications des algorithmes quantiques variationnels.

Applications

- Algorithmes de l'ordinateur quantique
 - o Une amélioration radicale de la construction des programmes quantiques.
 - o Résoudront à terme des problèmes prototypiques, plus vastes que Fermi-Hubbard, en physique de la matière condensée et en chimie quantique
 - o Permettre éventuellement de comprendre des matériaux aux propriétés exotiques.

Avantages techniques

- Le premier VQA à introduire des termes de rupture de symétrie dans le VHA.
- La méthode fournit plusieurs voies vers des systèmes de tailles croissantes.
- Méthode résiliente au bruit en raison de sa nature variationnelle.
- La flexibilité de la méthode provient de la liberté dont on dispose pour la conception de la forme variationnelle (*l'ansatz*), avec une pléthore de choix applicables à différents problèmes.

Avantages commerciaux

- Cette invention est au cœur d'un domaine en très grande expansion .
 - o Le marché des logiciels d'informatique quantique devrait passer de 0,11 milliard de dollars américains en 2021 à 0,43 milliard en 2026, soit un TCAC de 30,5 % ! Source : Markets and Markets.

Mots clés

- Algorithmes variationnels quantiques, *ansatz* d'état variationnel, forme variationnelle, solveur quantique variationnel (VQE), algorithme d'optimisation approximative quantique (QAOA).

Maturité de la technologie

TRL 4-5

- Des résultats extrêmement prometteurs ont été obtenus : cette nouvelle forme variationnelle QOCA a résolu le problème de simulation du modèle de Fermi-Hubbard avec quatre et six sites. Ce modèle est central dans la recherche sur les matériaux quantiques tels que les supraconducteurs à haute température.
<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.3.023092>
- Entreprises ciblées :
 - o Plusieurs entreprises, start-ups et laboratoires de recherche mènent des travaux impliquant des algorithmes quantiques variationnels.
 - o IBM Q, Google Quantum AI, Microsoft Quantum, Zapata Computing, PhaseCraft, 1Qbit, Zapata, Q-Ctrl, HQS Quantum Simulations.

Propriété intellectuelle



200-35, Radisson
Sherbrooke QC J1L 1E2
CANADA

t 819 821-7961

- Demande internationale de brevet (WO2021/203202A1)

Ce que nous recherchons

- Licences. Partenaires de développement.

Inventor Contact

Professor Alexandre Blais

Alexandre.Blais@USherbrooke.ca

Contact TransferTech Sherbrooke

François Nadeau

f.nadeau@transfertech.ca

873 339-2028

www.transfertech.ca

