

CONTRATS DOCTORAUX 2025
PROJET QUANTEDU

Sujet de thèse – Laboratoire Analyse, Géométrie et Applications (LAGA)

Sujet: Compression de la préparation d'état pour algorithmes quantiques variationnels sur simulateurs

Directeur de thèse: Olivier Lafitte

Co-encadrant: Igor Chollet

Le sujet proposé ici s'intéresse à l'estimation, à travers la simulation d'ordinateurs quantiques sur des architectures classiques de calcul, d'énergies dont l'expression est donnée par :

$$\langle \psi(\theta) | \mathcal{H} | \psi(\theta) \rangle.$$

Dans cette formule, \mathcal{H} désigne un opérateur Hamiltonien dont l'évaluation est supposée réalisable en un temps polynomial en le nombre de qubit du système et $\psi(\theta)$ désigne un état quantique paramétré par un ensemble de réels $\{\theta_i\}_{i=1}^N$. Un exemple de tel état est donné par l'application d'un opérateur $\mathcal{U}(\theta)$ de préparation d'état à un état fondamental. Typiquement, nous pouvons nous intéresser à des $\mathcal{U}(\theta)$ de la forme [1]

$$\mathcal{U}(\theta) = \prod_k e^{i\theta_k G_k}$$

où les G_k désignent des opérateurs hermitiens. Ces opérateurs $\mathcal{U}(\theta)$ se représentent alors par des matrices hermitiennes de tailles exponentiellement dépendantes du nombre de qubits utilisés pour les encoder. Cette dépendance exponentielle en le nombre de qubits rend l'application ou le stockage naïfs rapidement impossibles en pratique. Il s'agit d'un point critique limitant le nombre de qubit simulables sur des architectures de calcul classiques pour toute une gamme d'algorithmes nommés VQA pour **V**ariational **Q**uantum **A**lgorithms, primordiaux notamment pour leurs applications à la chimie quantique.

L'objectif de la thèse présentée succinctement dans ce document est de repousser les limites des simulations en termes de qubits simulables. Pour cela, il devra être question de combiner les approches de compression de tenseurs [2,3] pour la simulation de circuits quantiques aux méthodes exploitant les structures d'algèbre de Lie sous-jacentes [4]. En particulier, une attention importante sera portée sur la scalabilité des approches proposées, c'est à dire à leur adaptabilité aux architectures modernes classiques et parallèles de calcul. Les choix des structures de données, cruciaux dans les performances des simulateurs [5], seront également au cœur de l'étude, avec en particulier le souci de la façon dont les différents niveaux d'optimisation mathématiques et informatiques peuvent se composer avec ces choix. Enfin, dans un objectif d'accélération des simulations, le préconditionnement des méthodes retenues pourrait également faire l'objet d'une étude mathématique.

Références :

[1] A. F. Izmaylov, R. A. Lang, and T.-C. Yen, Analytic gradients in variational quantum algorithms: Algebraic extensions of the parameter-shift rule to general unitary transformations, Physical Review A, 104 (2021)

[2] H. Bayraktar et al, cuQuantum SDK: A High-Performance Library for Accelerating Quantum Science, in 2023 IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering, (2023)

- [3] L. Grasedyck and W. Hackbusch, An introduction to hierarchical h-rank and tt-rank of tensors with examples, *Computational Methods in Applied Mathematics*, 11 (2011)
- [4] A. Izmaylov, M. Diaz-Tinoco, and R. Lang, On the order problem in construction of unitary operators for the variational quantum eigensolver, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 22 (2020)
- [5] M. Vallerio, F. Vella, and P. Rech, State of practice: evaluating gpu performance of state vector and tensor network methods, (2024)
- [6] H. Boumaza and O. Lafitte, The band spectrum of the periodic airy-schrödinger operator on the real line, *Journal of Differential Equations*, 264 (2018)