



CENTRE EUROPÉEN DE RECHERCHE ET DE FORMATION AVANCÉE EN **CALCUL SCIENTIFIQUE**



## Journée CCRT – 12 Décembre

Presented by

**Adrien Suau**  
[adrien.suau@cerfacs.fr](mailto:adrien.suau@cerfacs.fr)  
CERFACS, LIRMM

In collaboration with

**Gabriel Staffelbach**  
[gabriel.staffelbach@cerfacs.fr](mailto:gabriel.staffelbach@cerfacs.fr)  
CERFACS

**Henri Calandra**  
[henri.calandra@total.com](mailto:henri.calandra@total.com)  
Total

**Aida Todri-Sanial**  
[aida.todri@lirmm.fr](mailto:aida.todri@lirmm.fr)  
LIRMM, CNRS

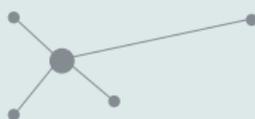
**Eric Bourreau**  
[eric.bourreau@lirmm.fr](mailto:eric.bourreau@lirmm.fr)  
LIRMM

# Introduction

- ▶ une des pistes pour le futur du HPC
- ▶ accélération théorique potentielle du quantique par rapport au classique
- ▶ Mais... peu d'algorithmes existants => nécessite un effort de recherche

# Applications potentielles du calcul quantique

"" Recherche non ordonnée ""



## Algorithme de Grover

### Conditions

- ▶ L'élément cherché est unique
- ▶ Boîte noire qui reconnaît l'élément cherché

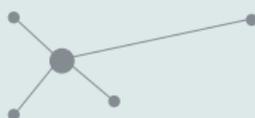
### Résultats

- ▶ L'élément cherché est trouvé en  $\mathcal{O}(\sqrt{N})$  appels à la boîte noire

---

. Lov K. Grover. "A fast quantum mechanical algorithm for database search". In : (mai 1996). eprint : [quant-ph/9605043v3](https://arxiv.org/abs/quant-ph/9605043v3). url : <http://arxiv.org/abs/quant-ph/9605043v3>.

# Chimie quantique



## Algorithme VQE

### Conditions

- ▶ Pas de condition particulière
- ▶ Applicable à toutes les molécules si suffisamment de qubits

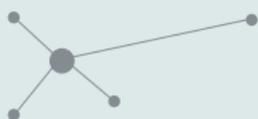
### Résultats

- ▶ Approxime l'état fondamental d'une molécule
- ▶ Iterations en  $\mathcal{O}(\log_2(N))$
- ▶ Résistant au bruit

---

. Alberto Peruzzo et al. "A variational eigenvalue solver on a quantum processor". In : (avr. 2013). Nature Communications, 5 :4213, (2014). doi : [10.1038/ncomms5213](https://doi.org/10.1038/ncomms5213). eprint : 1304.3061v1. url : <http://arxiv.org/abs/1304.3061v1>.

# Systeme lineaires



## Algorithme HHL & VQLSS

### Conditions

- ▶ Matrice  $A$  creuse et Hermitienne
- ▶ Membre de droite  $b$  encodé dans un état quantique
- ▶  $A$  inversible

### Résultats

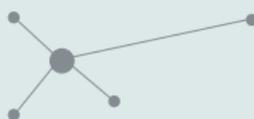
- ▶ Résout  $Ax = b$  en temps  $\mathcal{O}(\log_2(N))$
- ▶ Encode le résultat  $x$  dans un registre quantique

---

. Citations sur page suivante

- ▶ Aram W. Harrow, Avinatan Hassidim et Seth Lloyd. “Quantum Algorithm for Linear Systems of Equations”. In : *Physical Review Letters* 103 (15 oct. 2009). Phys. Rev. Lett. vol. 15, no. 103, pp. 150502 (2009). doi : [10.1103/PhysRevLett.103.150502](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.150502). eprint : 0811.3171v3. url : <http://link.aps.org/article/10.1103/PhysRevLett.103.150502>
- ▶ Carlos Bravo-Prieto et al. “Variational Quantum Linear Solver : A Hybrid Algorithm for Linear Systems”. In : (sept. 2019). eprint : 1909.05820v1. url : <http://arxiv.org/abs/1909.05820v1>

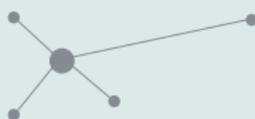
# Perspective : Équations différentielles ?



- ▶ Énormément de domaines concernés
- ▶ Applications très variées

## Exemples :

- ▶ Imagerie sismique (équation des ondes)
- ▶ Mécanique des fluides numérique (Navier-Stokes)
- ▶ ...



## Quelle équation choisir ?

- ▶ Énormément de possibilités
- ▶ Commencer avec quelque chose de “simple”
- ▶ Étude de l'état de l'art

## Choix final

### Équation des ondes 1D (avec la QLM)

---

. Pedro C. S. Costa, Stephen Jordan et Aaron Ostrander. “Quantum algorithm for simulating the wave equation”. In : *Physical Review A* 99 (1 jan. 2019). Phys. Rev. A 99, 012323 (2019). doi : 10.1103/PhysRevA.99.012323. eprint : 1711.05394v1. url : <http://arxiv.org/abs/1711.05394v1>.

# Comment résoudre l'équation des ondes ?

Suivant Costa, Jordan et Ostrander , l'équation des ondes

$$\frac{d^2}{dt^2}\phi = \frac{d^2}{dx^2}\phi$$

- + conditions aux bords
- + état initial
- + vitesse de propagation fixée  $c = 1$ .

peut être résolue en simulant l'action d'un Hamiltonien spécifique sur un état quantique encodant l'état initial.

---

. Pedro C. S. Costa, Stephen Jordan et Aaron Ostrander. "Quantum algorithm for simulating the wave equation". In : *Physical Review A* 99 (1 jan. 2019). Phys. Rev. A 99, 012323 (2019). doi : 10.1103/PhysRevA.99.012323. eprint : 1711.05394v1. url : <http://arxiv.org/abs/1711.05394v1>.

# Comment résoudre l'équation des ondes ?

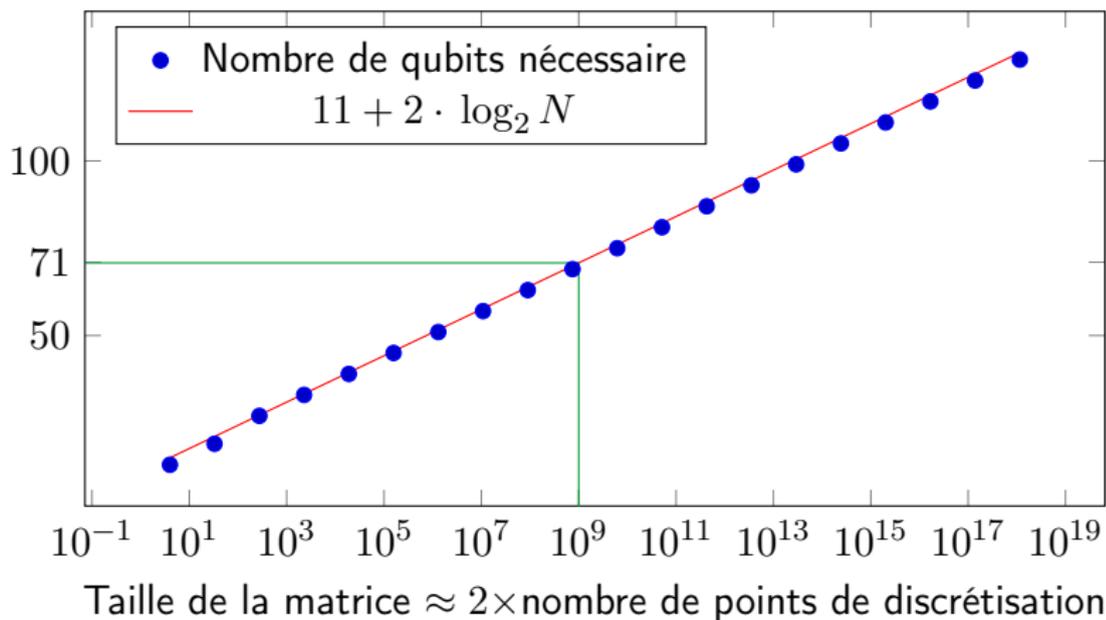
## Exemple de code

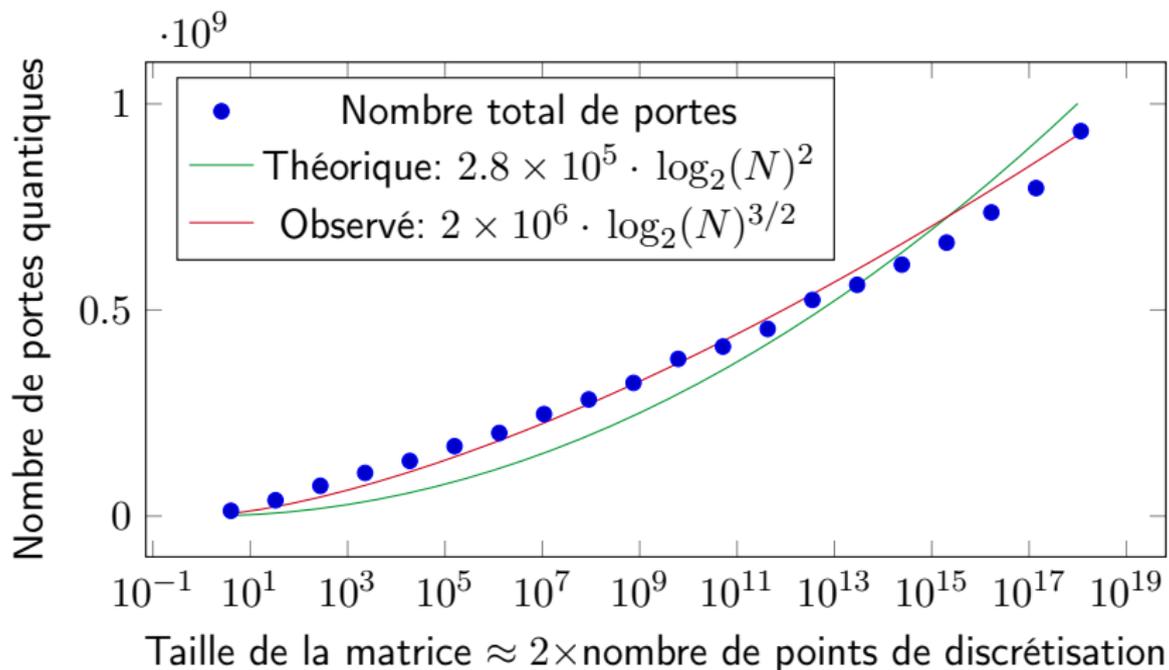
```
1 def simulate_unsigned_integer_weighted_hamiltonian(  
2     0: Oracle, n: int, int_size: int, time: float  
3 ) -> NamedRoutine:  
4     r""" [Documentation...] """  
5     oracle_ancilla_size = 0.arity - (n + n + int_size)  
6     # Aliases to make the code more readable.  
7     x = list(range(0, n))  
8     m = list(range(n, 2 * n))  
9     v = list(range(2 * n, 2 * n + int_size))  
10    p = 2 * n + int_size  
11    a = list(range(2 * n + int_size + 1, 2 * n + int_size + 1 + oracle_ancilla_size))  
12  
13    routine = NamedRoutine(  
14        "simulate_unsigned_integer_weighted_hamiltonian",  
15        arity=2 * n + int_size + 1 + oracle_ancilla_size,  
16    )  
17  
18    routine.protected_apply(0, x, m, v, a)  
19    routine.protected_apply(A(n), x, m, p)  
20  
21    routine.apply(exp_ZFt(int_size, time), p, v)  
22  
23    routine.protected_apply(A(n).dag(), x, m, p)  
24    routine.protected_apply(0.dag(), x, m, v, a)  
25  
26    return routine
```

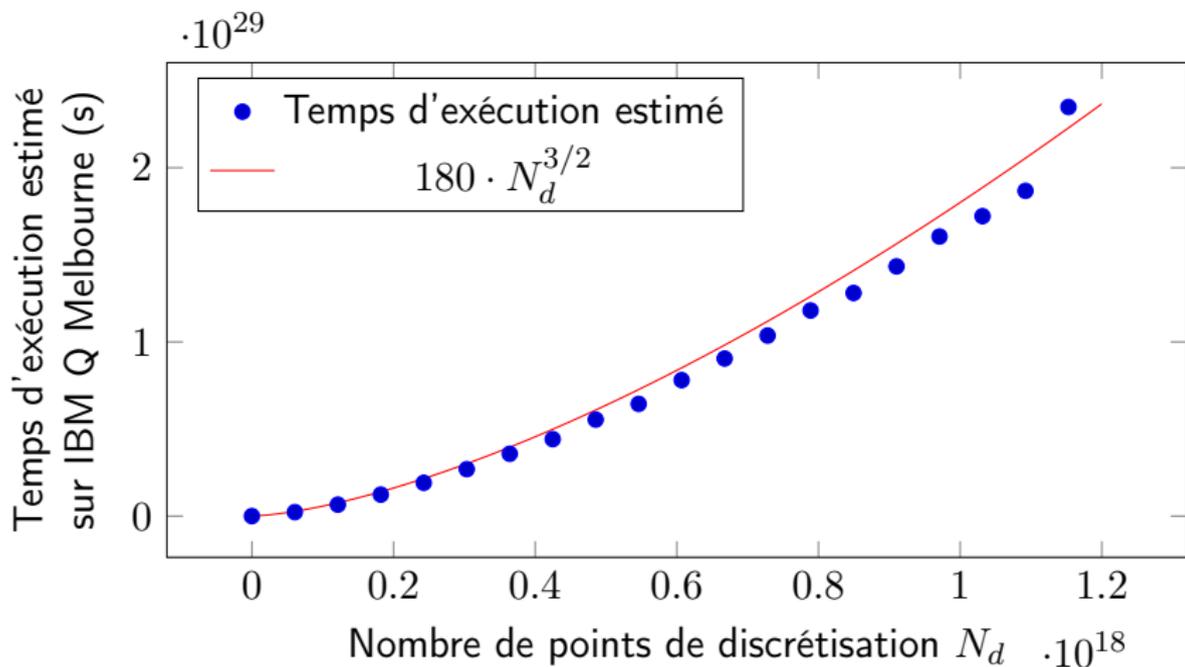
# Résultats expérimentaux

# Film

Nombre de qubits nécessaire pour résoudre l'équation des ondes 1D



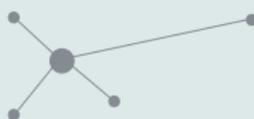




# Conclusions & perspectives

- ▶ Un ordinateur quantique peut résoudre une équation différentielle
- ▶ La QLM d'Atos est un bon outil pour tester nos implémentations d'algorithmes quantiques sans bruit ni problèmes de cohérence

- ▶ Thèse de doctorat commencée en Novembre sur la construction d'une bibliothèque "Q-BLAS"
- ▶ Travail sur les algorithmes quantiques d'algèbre linéaire (résolution de systèmes linéaires par exemple) et de résolution d'équation différentielle



Merci à

- ▶ l'université de Reims
- ▶ Total
- ▶ CCRT

pour les accès à la QLM d'Atos

# Thank you for your attention !

## Any question ?

Contact information :

- ▶ Mail : [adrien.suau@cerfacs.fr](mailto:adrien.suau@cerfacs.fr) / [adrien.suau@lirmm.fr](mailto:adrien.suau@lirmm.fr)
- ▶ Phone : +33(0)5 61 19 31 19