



# LIE ALGEBRA BASED QUANTUM COMPUTING

Frédéric **BARBARESCO**  
Quantum Algorithms & Computing  
Segment Leader  
THALES

# Introduction

- Les calculateurs quantiques à portes manipulent des représentations unitaires de matrices, ce qui les rend très adaptés pour faire des calculs d'algèbre de Lie.
  - La théorie de quantification géométrique met en correspondance l'espace de Hilbert des états quantiques avec la représentation unitaire de groupes de Lie.
  - Dans le domaine de l'apprentissage profond géométrique, les schémas équivariants utilisant des convolutions sur les groupes de Lie, semblent bien adaptés pour être codés sur des machines à portes.
- ⇒ **Tout ceci fait des calculateurs quantiques à portes des candidats naturels pour manipuler des calculs d'algèbre de Lie.**
- **Les domaines d'emploi de l'algèbre de Lie**
    - › Codage des Qubits par représentation unitaire
    - › Codes correcteurs d'erreur (Kitaev)
    - › Synthèse de circuits quantiques
    - › Convolution sur les groupes de Lie en quantique pour réseaux de neurones profonds équivariants
    - › Algorithmes quantiques basés sur les groupes de Lie

# Référence Bibliographiques

- ▶ [1] Bobak T. Kiani, Horizons of Artificial Intelligence in Quantum Computation, PhD Massachusetts Institute of Technology, Department of Electrical Engineering and Computer Science, June 2023 ; <https://dspace.mit.edu/handle/1721.1/151436>
- ▶ [2] Grecia Castelazo, Quynh T Nguyen, Giacomo De Palma, Dirk Englund, Seth Lloyd, and Bobak T Kiani. Quantum algorithms for group convolution, cross-correlation, and equivariant transformations. arXiv preprint arXiv:2109.11330, 2021
- ▶ Video: [https://www.youtube.com/watch?v=WU0sZUHyHE0&list=PL2943vWJNLIFyF4yzoB5AHMcF9mI\\_hZTq&index=8](https://www.youtube.com/watch?v=WU0sZUHyHE0&list=PL2943vWJNLIFyF4yzoB5AHMcF9mI_hZTq&index=8)
- ▶ [3] Bobak Kiani, Randall Balestriero, Yann LeCun, and Seth Lloyd. projUNN: efficient method for training deep networks with unitary matrices. In Alice H. Oh, Alekh Agarwal, Danielle Belgrave, and Kyunghyun Cho, editors, Advances in Neural Information Processing Systems, 2022
- ▶ [4] N. L. Diaz, Diego García-Martín, Sujay Kazi, Martin Larocca, M. Cerezo, Showcasing a Barren Plateau Theory Beyond the Dynamical Lie Algebra, arXiv:2310.11505v1; <https://doi.org/10.48550/arXiv.2310.11505>, Oct. 2023
- ▶ [5] Sujay S Kazi, Martin Larocca, Robert Zeier, Marco Farinati, Marco Cerezo, Patrick J Coles, The Landscape of Max-Cut QAOA Lie Algebras, APS March Meeting 2023, Las Vegas, Nevada (March 5-10), Session Z70: Algorithms for Quantum Annealers and Analog Computers
- ▶ [6] Michael Ragone, Paolo Braccia, Quynh T. Nguyen, Louis Schatzki, Patrick J. Coles, Frederic Sauvage, Martin Larocca, M. Cerezo, Representation Theory for Geometric Quantum Machine Learning, arXiv:2210.07980v2 [quant-ph], <https://doi.org/10.48550/arXiv.2210.07980>, Feb. 2023
- ▶ [7] Quynh T. Nguyen, Louis Schatzki, Paolo Braccia, Michael Ragone, Patrick J. Coles, Frederic Sauvage, Martin Larocca, M. Cerezo, Theory for Equivariant Quantum Neural Networks, arXiv:2210.08566v1 [quant-ph]  
<https://doi.org/10.48550/arXiv.2210.08566>, Oct. 2022
- ▶ [8] Maximilian Balthasar Mansky, Santiago Londoño Castillo, Victor Ramos Puigvert, Claudia Linnhoff-Popien , Near-optimal quantum circuit construction via Cartan decomposition, arXiv:2212.12934v3 [quant-ph]  
<https://doi.org/10.48550/arXiv.2212.12934>
- ▶ [9] A. Yu. Kitaev, “Quantum computations: algorithms and error correction”, Uspekhi Mat. Nauk, 52:6(318) (1997), 53–112; Russian Math. Surveys, 52:6 (1997), 1191–1249;

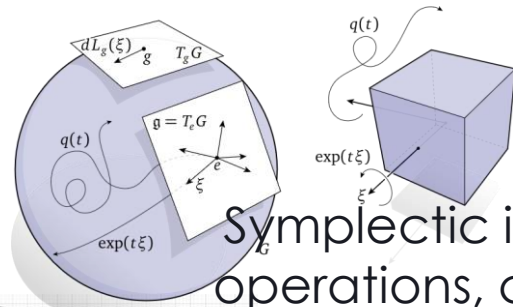
# AI/Machine Learning Evolution: ALGEBRA COMPUTATION STRUCTURES

Calcul formel pour les méthodes de Lie en mécanique hamiltonienne

P.V. Koseleff, X/CMLS PhD, 1993 (P. Cartier)

Souriau Exponential Map Algorithm for Machine Learning on Matrix Lie Groups

Frédéric Barbaresco, Springer GSI'19, 2019



Symplectic integrators, non-commutative operations, coadjoint orbits, moment map

Supervarieties, Sov. Math. Dokl. 16 (1975), 1218-1222.  
F. A. Berzin and D. A. Leites

$$X = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix}$$

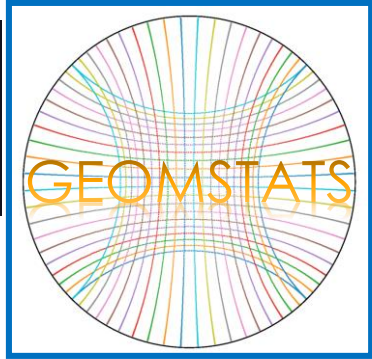
Ber(X) = det(A) det(D - CA<sup>-1</sup>B)<sup>-1</sup>  
Berezian Determinant

**LIE ALGEBRA**

**LIE SUPER ALGEBRA**



Computer Algebra Group- Scratchpad, IBM, 1971



$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & D \\ E & F \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} G \\ H \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A \times G + B \times H \\ C \times G + D \times H \\ E \times G + F \times H \end{bmatrix}$$

**LINEAR ALGEBRA**

Vectors space, commutative matrix operations, eigen-analysis



GOOGLE TPU (Tensor Processing Unit)

x	y	x AND y	x OR y	NOT x	NOT y
0	0	0	0	1	1
0	1	0	1	1	0
1	0	0	1	0	1
1	1	1	1	0	0

**BOOLE ALGEBRA**

Boolean logic digital circuits using electromechanical relays as the switching element.



George R. Stibitz (Bell Labs)

ALGEBRA is the study of mathematical symbols and the rules for manipulating these symbols

# GEOMSTATS: PYTHON Library for Lie Group Machine Learning



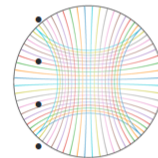
Geomstats

<https://github.com/geomstats/geomstats>

pypi package 2.1.0 build passing codecov 92% codecov unknown codecov unknown (Coverages for: numpy, tensorflow, pytorch)

Geomstats is an open-source Python package for computations and statistics on manifolds. The package is organized into two main modules: `geometry` and `learning`.

The module `geometry` implements concepts in differential geometry, and the module `learning` implements statistics and learning algorithms for data on manifolds.



To get started with `geomstats`, see the [examples directory](#).

For more in-depth applications of `geomstats`, see the [applications repository](#).

The documentation of `geomstats` can be found on the [documentation website](#).

If you find `geomstats` useful, please kindly cite our [paper](#).

Install geomstats via pip3

Video: <https://m.youtube.com/watch?v=Ju-Wsd84uG0>

```
pip3 install geomstats
```

<https://hal.inria.fr/hal-02536154>

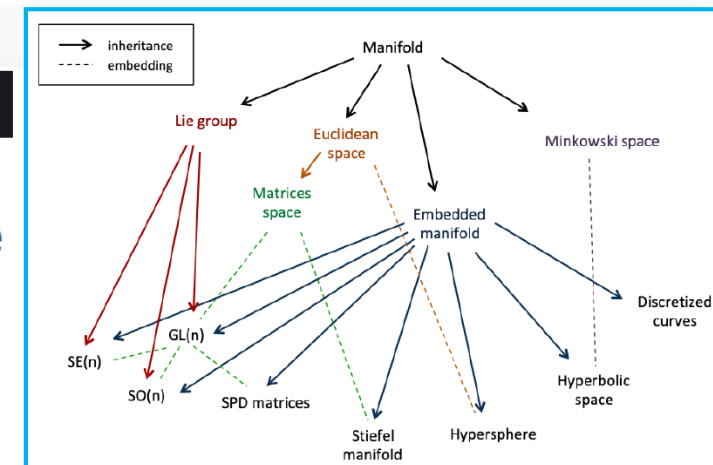
hal-02536154, version 1

Pré-publication, Document de travail ⓘ

## Geomstats: A Python Package for Riemannian Geometry in Machine Learning

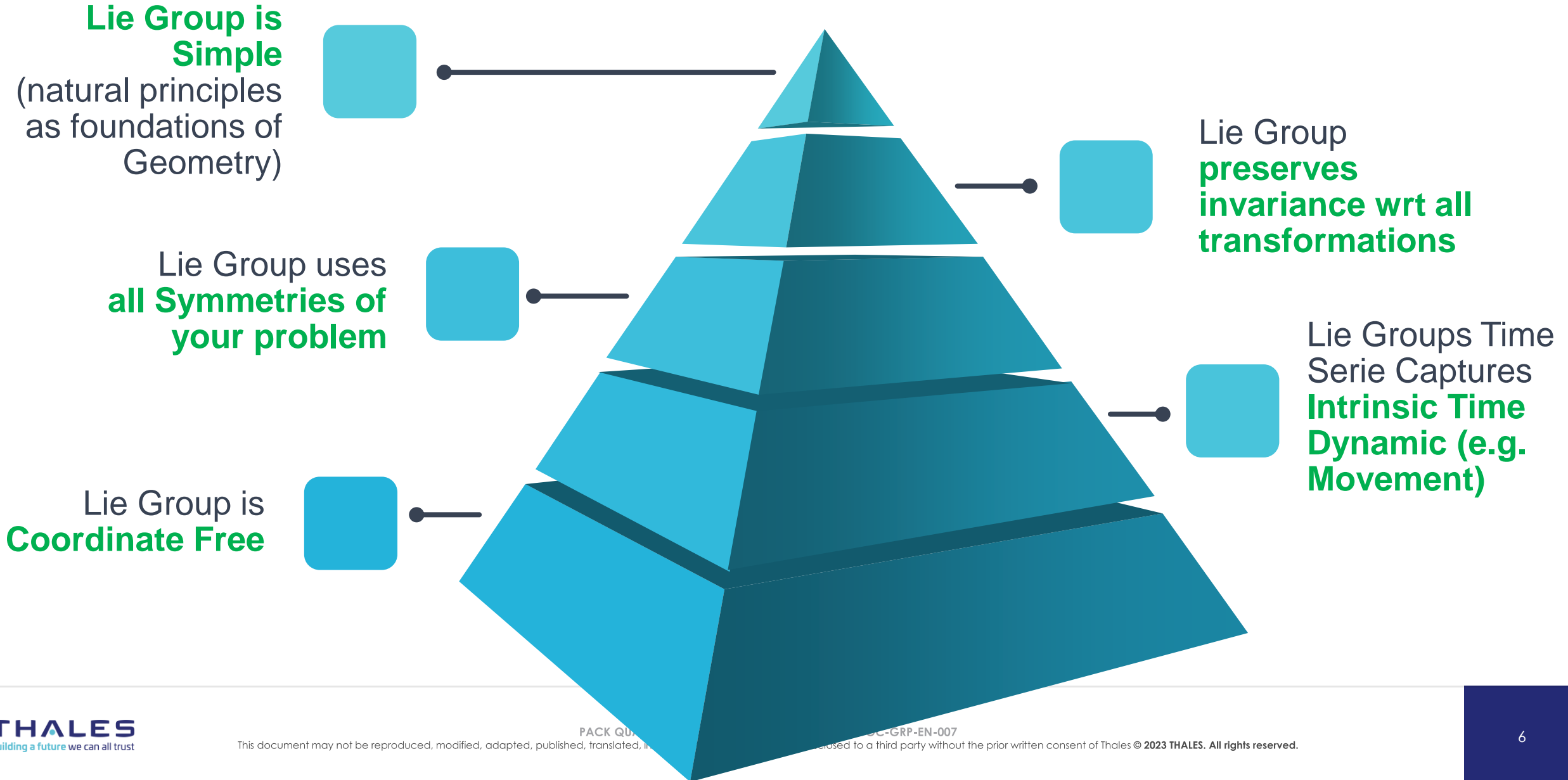
Nina Miolane<sup>1</sup>, Alice Le Brigant, Johan Mathe<sup>2</sup>, Benjamin Hou<sup>3</sup>, Nicolas Guigui<sup>4,5</sup>, Yann Thanwerdas<sup>4,5</sup>, Stefan Heyder<sup>6</sup>, Olivier Peltre, Niklas Koep, Hadi Zaatiti<sup>7</sup>, Hatem Hajri<sup>7</sup>, Yann Cabanes, Thomas Gerald, Paul Chauchat<sup>8</sup>, Christian Shewmake, Bernhard Kainz, Claire Donnat<sup>9</sup>, Susan Holmes<sup>1</sup>, Xavier Pennec<sup>4,5</sup>

Détails



HALES. All rights reserved.

# Rational to Use Lie Groups for Computation



# Symmetry Group Equivariance in Physics

## > Reference:

▶ <https://arxiv.org/abs/2203.06153>

---

---

Submitted to the Proceedings of the US Community Study  
on the Future of Particle Physics (Snowmass 2021)

---

---

## Symmetry Group Equivariant Architectures for Physics A Snowmass 2022 White Paper

Alexander Bogatskiy<sup>1</sup>, Sanmay Ganguly<sup>2</sup>, Thomas Kipf<sup>3</sup>, Risi Kondor<sup>4</sup>, David W. Miller<sup>\*4</sup>, Daniel Murnane<sup>5</sup>, Jan T. Offermann<sup>4</sup>, Mariel Pettee<sup>†5</sup>, Phiala Shanahan<sup>6</sup>, Chase Shimmin<sup>7</sup>, and Savannah Thais<sup>8</sup>

<sup>1</sup>*Flatiron Institute*

<sup>2</sup>*ICEPP, University of Tokyo*

<sup>3</sup>*Google Research*

<sup>4</sup>*University of Chicago*

<sup>5</sup>*Lawrence Berkeley National Laboratory*

<sup>6</sup>*Massachusetts Institute of Technology*

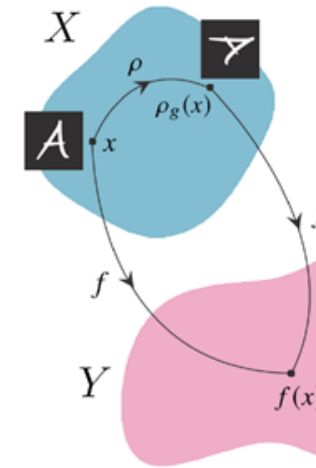
<sup>7</sup>*Yale University*

<sup>8</sup>*Princeton University*

March 14, 2022

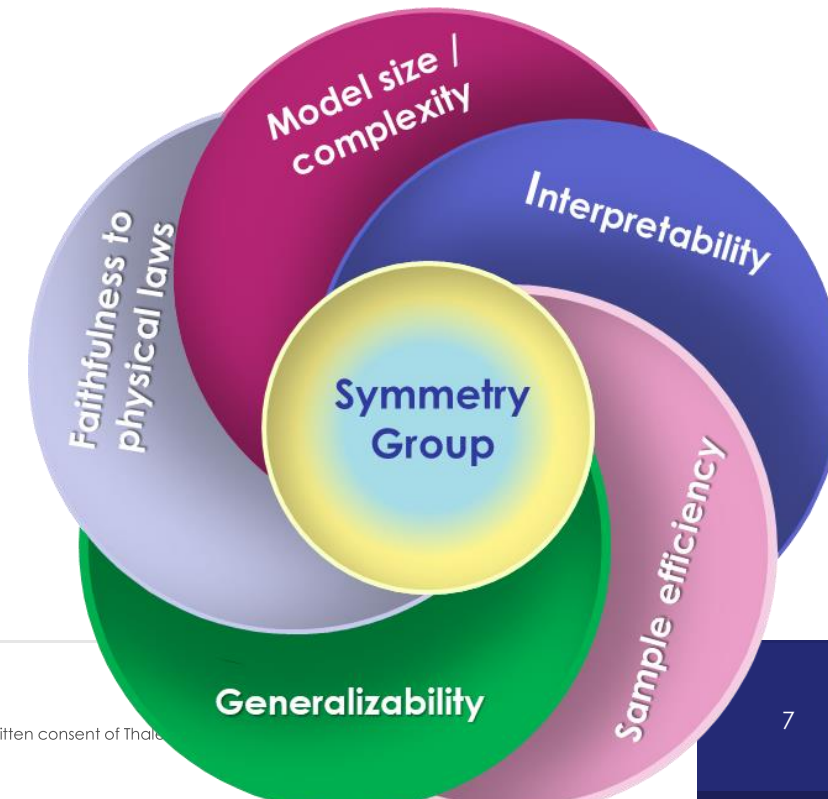
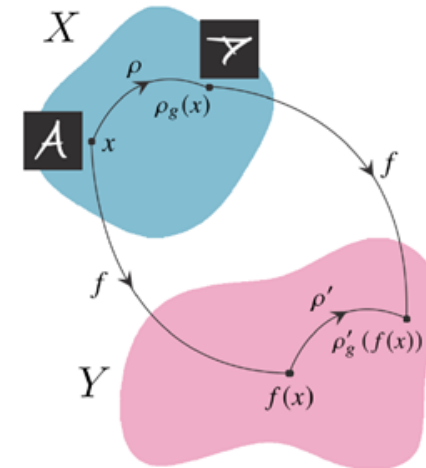
### Invariance

$$f(\rho_g(x)) = f(x)$$



### Equivariance

$$f(\rho_g(x)) = \rho'_g(f(x))$$



# EUROPEAN ACTIONS : COST CaLISTA & MSCA CaLIGOLA



**CaLIGOLA**  Funded by the European Union

HOME ABOUT CALIGOLA PROJECT OUR NETWORK WORK PACKAGE LIST ▾ EVENTS SECONDMENTS PUBLICATIONS



**CaLIGOLA**  
 Cartan geometry, Lie and representation theory, Integrable Systems, quantum Groups and quantum computing towards the understanding of the geometry of deep Learning and its Applications

[Go to page](#)



**CALIGOLA**  
 Horizon Europe Framework Programme MSCA Staff Exchanges 2021 (HORIZON-MSCA-2021-SE-01) Project ID: 101086123

<https://site.unibo.it/caligola/en>



COST ACTION  
**CaLISTA**

HOME ABOUT CALISTA PROJECT WORKING GROUPS ▾ EVENTS MOBILITY GRANTS PUBLICATIONS PUBLIC OUTREACH

CONTACTS

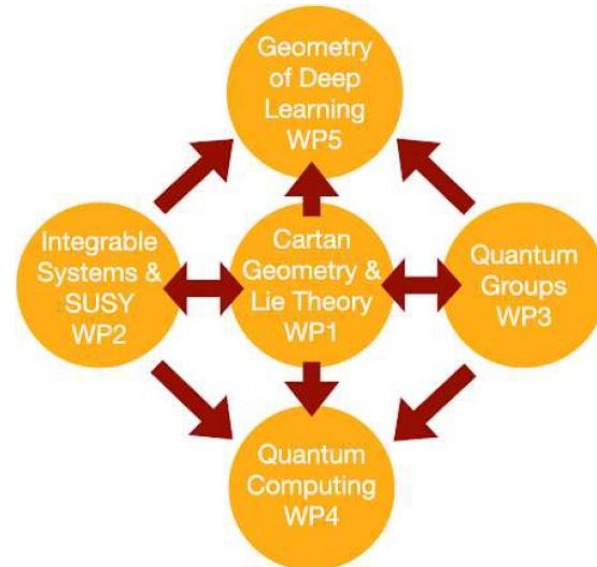


## CA21109 – COST Action CaLISTA – How to participate in the Action

Cartan geometry, Lie, Integrable Systems, quantum group Theories for Applications - CaLISTA aims to advance cutting-edge research in mathematics and physics through a systematic application of the ideas and philosophy of Cartan geometry, a thorough Lie theoretic approach to differential geometry.

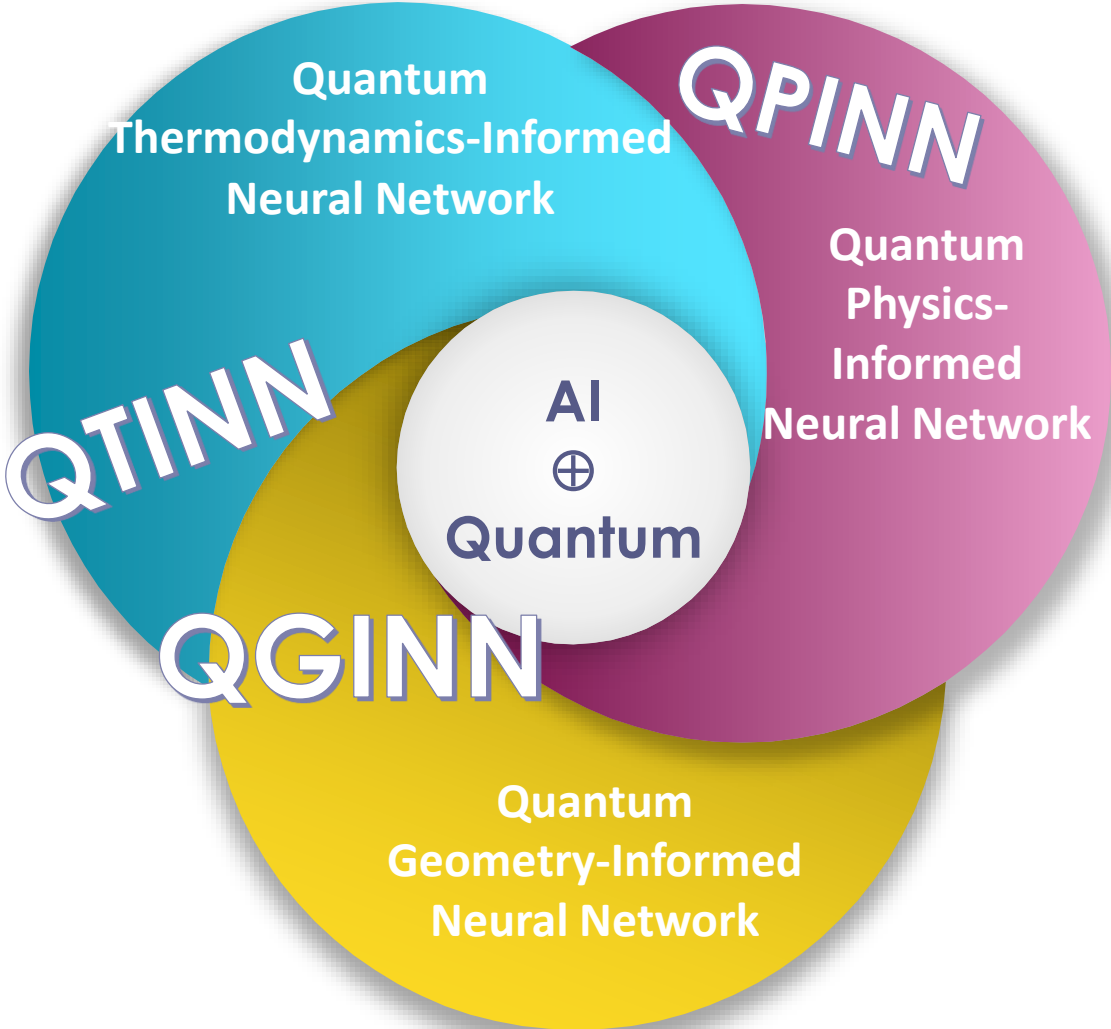


<https://site.unibo.it/calista/en>





# Quantum Model- Informed Deep Learning



# Groupes et algèbres de Lie en informatique quantique

Tom De Coninck    Guillaume Tran

CentraleSupélec – Thales  
Encadré par Frédéric Barbaresco

Mercredi 24 avril 2024

# Notions de théorie de Lie

# Algèbre, algèbre de Lie

## Définition : $\mathbb{K}$ -algèbre

Soit  $\mathbb{K}$  un corps (en pratique, on prendra  $\mathbb{R}$  ou  $\mathbb{C}$  et il sera omis dans les notations). Une  $\mathbb{K}$ -**algèbre** est une structure algébrique  $(\mathcal{A}, +, \cdot, \times)$  si  $(\mathcal{A}, +, \cdot)$  est un  $\mathbb{K}$ -espace vectoriel et si l'application :

$$\begin{aligned} \mathcal{A} \times \mathcal{A} &\longrightarrow \mathcal{A} \\ (x, y) &\longmapsto x \times y \end{aligned}$$

est bilinéaire.

# Algèbre, algèbre de Lie

## Définition : algèbre de Lie

On dit que  $(\mathfrak{g}, +, \cdot, [\cdot, \cdot])$  est une **algèbre de Lie** si c'est une algèbre, dont la seconde loi de composition interne  $[\cdot, \cdot]$  vérifie les conditions suivantes :

- $\forall x, y \in \mathfrak{g}, [x, y] = -[y, x]$
- $\forall x, y, z \in \mathfrak{g}, [x, [y, z]] + [y, [z, x]] + [z, [x, y]] = 0$  (identité de Jacobi)

## Quelques exemples d'algèbres de Lie matricielles

- L'ensemble des matrices carrées de tailles  $n$  à coefficients dans  $\mathbb{K}$  muni du commutateur  $[A, B] = AB - BA$ , noté  $\mathfrak{gl}(n, \mathbb{K})$ .
- L'ensemble des matrices de trace nulle :

$$\mathfrak{sl}(n, \mathbb{K}) = \{X \in \mathfrak{gl}(n, \mathbb{K}), \operatorname{tr} X = 0\}$$

- L'ensemble des matrices antisymétriques réelles :

$$\mathfrak{so}(n) = \{X \in \mathfrak{gl}(n, \mathbb{R}), X = -{}^t X\}$$

- L'ensemble des matrices antihermitiennes complexes à trace nulles :

$$\mathfrak{su}(n) = \{X \in \mathfrak{gl}(n, \mathbb{C}), X = -X^\dagger, \operatorname{tr} X = 0\}$$

# Étude des commutateurs

Prenons l'exemple de  $\mathfrak{su}(2)$ . Une base (au sens algébrique habituel du terme) de cette algèbre est donnée par :

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

et on a :

$$[X, Y] = 2Z \quad [Y, Z] = 2X \quad [Z, X] = 2Y$$

ce qui permet de trouver tous les autres commutateurs de  $\mathfrak{su}(2)$ . **La donnée des crochets d'une base détermine la structure de l'algèbre de Lie.**

# Représentation d'une algèbre de Lie

## Définition : représentation

On appelle **représentation** d'une algèbre de Lie  $\mathfrak{g}$  sur un espace vectoriel  $V$  la donnée d'une application linéaire  $\rho : \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{gl}(V)$  compatible avec les crochets de Lie, c'est à dire :

$$\forall x, y \in \mathfrak{g}, \rho([x, y]) = [\rho(x), \rho(y)] = \rho(x) \circ \rho(y) - \rho(y) \circ \rho(x)$$

Pour  $X \in \mathfrak{g}$  et  $v \in V$ , on peut ainsi définir l'**action** de  $X$  sur  $v$  :

$$X \cdot v = \rho(X)(v)$$



# Application concrète des représentations

En physique quantique, on peut montrer que les opérateurs décrivant un spin doivent respecter les conditions suivantes :

$$[S_x, S_y] = S_z \quad [S_y, S_z] = S_x \quad [S_z, S_x] = S_y$$

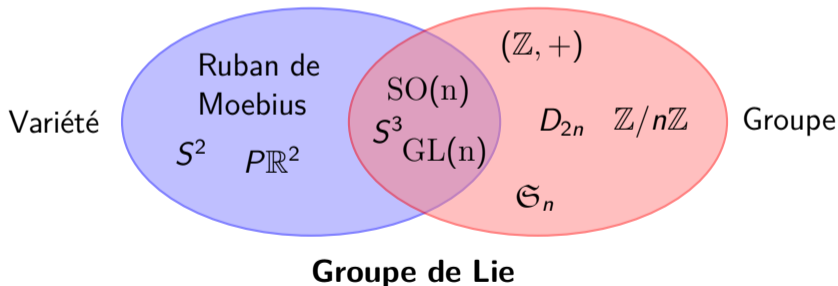
ce qui ressemble fortement à la structure de l'algèbre  $\mathfrak{su}(2)$  que l'on a évoquée précédemment, à un facteur 2 près. **C'est donc une représentation de  $\mathfrak{su}(2)$ .**

En réalité, on peut montrer que les représentations de  $\mathfrak{su}(2)$  sont quantifiées par un entier  $m$ . **La quantification du spin est une conséquence de la structure de ses opérateurs, et il vaut donc  $m/2$**  (le 2 provenant du facteur manquant dans les relations de commutation).

# Groupes de Lie

Définition : groupe de Lie

Un **groupe de Lie** est une variété différentielle munie d'une structure de groupe.



## Exemple de groupes de Lie

- Le groupe des matrices inversibles  $GL(n, \mathbb{K})$
- Le groupe des matrices inversibles de déterminant 1  $SL(n, \mathbb{K})$
- Le groupe des matrices orthogonales :

$$O(n) = \{M \in GL(n, \mathbb{R}), M = -{}^t M\}$$

- Le groupe des matrices unitaires :

$$U(n) = \{M \in GL(n, \mathbb{C}), M = -M^\dagger\}$$

- les groupes spécial orthogonal  $SO(n)$  et spécial unitaire  $SU(n)$  dans lesquels on rajoute la contrainte d'avoir un déterminant égal à 1 aux groupes  $O(n)$  et  $U(n)$ .

# Lien entre groupe de Lie et algèbre de Lie

## Théorème

À tout groupe de Lie  $G$ , on peut associer une algèbre de Lie  $\mathfrak{g}$  : il s'agit de son espace tangent en son élément neutre. Le passage de l'un à l'autre se fait par l'intermédiaire de l'exponentielle, définie dans le cas des matrices par :

$$\begin{aligned} \exp : \mathfrak{g} &\longrightarrow G \\ X &\longmapsto \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{X^n}{n!} \end{aligned}$$

## Exemple d'un groupe de Lie commutatif

Les éléments de  $\mathfrak{so}(2)$  sont de la forme :

$$\mathfrak{so}(2) = \left\{ \begin{pmatrix} 0 & -\theta \\ \theta & 0 \end{pmatrix}, \theta \in \mathbb{R} \right\}$$

Et on peut montrer que :

$$\exp \begin{pmatrix} 0 & -\theta \\ \theta & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

On retrouve bien les matrices de rotations du plan, c'est à dire  $SO(2)$ . De plus, par les propriétés de l'exponentielle, on a :

$$\forall A, B \in \mathfrak{so}(2), \exp(A + B) = \exp(A) \exp(B)$$

# Formule de Baker Campbell Hausdorff

Attention, la dernière égalité n'est plus vraie dans le cas où le commutateur de  $A$  et  $B$  n'est pas nul. Dans ce cas, on a le résultat suivant.

## Théorème (Baker Campbell Hausdorff)

On a :

$$\forall A, B \in \mathfrak{g}, \exp(A) \exp(B) = \exp \left( A + B + \frac{1}{2}[A, B] + O(A^2, B^2) \right)$$

Autrement dit, le « défaut de commutation » des éléments du groupe de Lie est donné par l'étude des commutateur de l'algèbre de Lie.

# Quelques applications en informatique quantique







- Réseaux de neurones, QLM
- Algorithmes variationnel
- Décomposition de hamiltoniens
- Synthèse de circuits
- Correction d'erreur

# Quelques applications et références

- **Correction d'erreurs**

- Christopher J. Bumgardner. *Codes in  $W^*$ -metric Spaces : Theory and Examples*, PhD thesis, University of California, 2011.
- Greg Kuperberg, Nik Weaver. *A von Neumann algebra approach to quantum metrics*, American Mathematical Society, 2012.

# Quelques applications et références

- **VQAs - caractérisation plateaux stériles ("barren plateaus")**
  - Cerezo et al., *Cost function dependent barren plateaus in shallow parametrized quantum circuits*, 2021.
  - Larocca et al., *Diagnosing Barren Plateaus with Tools from Quantum Optimal Control*, 2022.
  - Goh et al., *Lie-algebraic classical simulations for variational quantum computing*, 2023.
  - Ragone et al., *A Unified Theory of Barren Plateaus for Deep Parametrized Quantum Circuits*, 2023.
  - Diaz et al., *Showcasing a Barren Plateau Theory Beyond the Dynamical Lie Algebra*, 2023.

# Quelques applications et références

- **VQAs - caractérisation plateaux stériles ("barren plateaus")**
  - Meyer et al., *Exploiting symmetry in variational quantum machine learning*, 2022.
  - McClean et al., *Barren plateaus in quantum neural network training landscapes*, 2023.
  - Fontana et al., *The Adjoint Is All You Need : Characterizing Barren Plateaus in Quantum Ansätze*, 2024.
- **VQAs - calcul de gradient**
  - Wiersema et Killoran, *Optimizing quantum circuits with Riemannian gradient flow*, 2023.
  - Heidari et al., *Efficient Gradient Estimation of Variational Quantum Circuits with Lie Algebraic Symmetries*, 2024.

# Quelques applications et références

- **QML - théories/entraînement de réseaux**
  - Kiani et al., *projUNN : efficient method for training deep networks with unitary matrices*, 2022.
  - Ragone et al., *Representation Theory for Geometric Quantum Machine Learning*, 2023.
  - Nguyen et al., *Theory for Equivariant Quantum Neural Networks*, 2023.
  - Anshuetz et Gao, *Arbitrary Polynomial Separations in Trainable Quantum Machine Learning*, 2024.

# Quelques applications et références

## ● Décomposition d'Hamiltonien pour la physique

- Kökcü et al., *Fixed Depth Hamiltonian Simulation via Cartan Decomposition*, 2022.
- Patel et Izmaylov, *Exactly solvable Hamiltonian fragments obtained from a direct sum of Lie algebras*, 2024.
- Gibbs et al., *Exploiting symmetries in nuclear Hamiltonians for ground state preparation*, 2024.
- D'andrea et al., *New basis for Hamiltonian  $SU(2)$  simulations*, 2024.

# Quelques applications et références

- **Synthèse de circuits**

- Mansky et al., *Near-optimal quantum circuit construction via Cartan decomposition*, 2023.
- Mansky et al., *Permutation-invariant quantum circuits*, 2023.
- Bao et Hartnett, *A Rubik's Cube inspired approach to Clifford synthesis*, 2024.
- Perrier et Jackson, *Solving the KP problem with the Global Cartan Decomposition*, 2024.

# Deux focus

## Algorithmes variationnels :

- Populaire en régime NISQ (peu de qubits, bruit)
- Large champ d'application
- Défis techniques : entraînement, précision



# Deux focus

## Algorithmes variationnels :

- Populaire en régime NISQ (peu de qubits, bruit)
- Large champ d'application
- Défis techniques : entraînement, précision

## Correction d'erreurs :

- Indispensable pour fabriquer des ordinateurs quantiques efficaces
- Analogie avec le cas classique

# Algèbres de Lie dynamiques - VQAs

# Distinction Algèbre de Lie (AL) - Algèbre de Lie Dynamique (ALD)

## Points communs

- Fondations mathématiques : espaces vectoriels équipés de crochets de Lie  $[\cdot, \cdot]$  (antisymétrie, identité de Jacobi)
- Éléments représentés par des opérateurs agissant sur des espaces vectoriels

# Distinction Algèbre de Lie (AL) - Algèbre de Lie Dynamique (ALD)

## Points communs

- Fondations mathématiques : espaces vectoriels équipés de crochets de Lie  $[\cdot, \cdot]$  (antisymétrie, identité de Jacobi)
- Éléments représentés par des opérateurs agissant sur des espaces vectoriels

## Distinction AL - ALDynamique

- Incorporation de paramètres : temps  $t$ , ensemble de paramètres  $\theta$
- Applications : où les lois de conservations/symétries changent avec le temps (mécanique quantique, robotique)

# Distinction Algèbre de Lie (AL) - Algèbre de Lie Dynamique (ALD)

## Points communs

- Fondations mathématiques : espaces vectoriels équipés de crochets de Lie  $[\cdot, \cdot]$  (antisymétrie, identité de Jacobi)
- Éléments représentés par des opérateurs agissant sur des espaces vectoriels

## Distinction AL - ALDynamique

- Incorporation de paramètres : temps  $t$ , ensemble de paramètres  $\theta$
- Applications : où les lois de conservations/symétries changent avec le temps (mécanique quantique, robotique) → **Algorithmes quantiques : algorithmes variationnels, QML**

# Contexte VQAs - ALD

## Références :

- Cerezo et al., *Cost function dependent barren plateaus in shallow parametrized quantum circuits*, 2021.
- Larocca et al., *Diagnosing Barren Plateaus with Tools from Quantum Optimal Control*, 2022.
- Goh et al., *Lie-algebraic classical simulations for variational quantum computing*, 2023.
- Ragone et al., *A Unified Theory of Barren Plateaus for Deep Parametrized Quantum Circuits*, 2023.
- Diaz et al., *Showcasing a Barren Plateau Theory Beyond the Dynamical Lie Algebra*, 2023.

# Contexte VQAs - ALD

## Références :

- Meyer et al., *Exploiting symmetry in variational quantum machine learning*, 2022.
- McClean et al., *Barren plateaus in quantum neural network training landscapes*, 2023.
- Fontana et al., *The Adjoint Is All You Need : Characterizing Barren Plateaus in Quantum Ansätze*, 2024.
- Anshuetz et Gao, *Arbitrary Polynomial Separations in Trainable Quantum Machine Learning*, 2024.

# Contexte VQAs

**Point clé : toute opération est représentable par un unitaire  $U$ , et les générateurs de ces opérations forment une algèbre de Lie.**



## Contexte VQAs

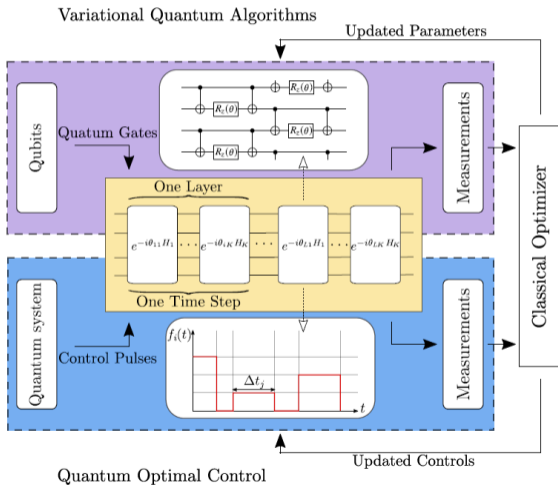
**Point clé : toute opération est représentable par un unitaire  $U$ , et les générateurs de ces opérations forment une algèbre de Lie.**

Circuit quantique  $U$  (n qubits, espace d'Hilbert  $\mathbf{H} = (\mathbb{C}^2)^{\otimes n}$ ) :

$$U(\boldsymbol{\theta}) = \prod_{l=1}^L \prod_{k=1}^K e^{-i\theta_{lk} H_k} \quad (1)$$

avec  $\boldsymbol{\theta} = [\theta_{11}, \dots, \theta_{LK}]$  set de paramètres,  $\{H_1, \dots, H_K\}$  générateurs de porte du circuit (opérateurs hermitiens). **À simuler et optimiser.**

# Contexte VQAs : simulation & optimisation



# Contexte VQAs : simulation & optimisation

**Simulation** - évaluation de la valeur attendue de l'observable  $O$ , de la forme

$$\langle O(\boldsymbol{\theta}) \rangle \equiv \text{Tr} [OU(\boldsymbol{\theta})\rho^{(in)}U^\dagger(\boldsymbol{\theta})] = \text{Tr} [O\rho^{(out)}(\boldsymbol{\theta})] \quad (2)$$

# Contexte VQAs : simulation & optimisation

**Simulation** - évaluation de la valeur attendue de l'observable  $O$ , de la forme

$$\langle O(\boldsymbol{\theta}) \rangle \equiv \text{Tr} [OU(\boldsymbol{\theta})\rho^{(in)}U^\dagger(\boldsymbol{\theta})] = \text{Tr} [O\rho^{(out)}(\boldsymbol{\theta})] \quad (2)$$

**Optimisation** - minimisation de la fonction coût via optimisation des paramètres  $\boldsymbol{\theta}$  du circuit  $U$ . Exemple : préparation de  $H_{initial} \longrightarrow$  fonction coût  $\langle H(\boldsymbol{\theta}) \rangle$

- **Étape nécessaire : calcul du gradient**  $\partial_{\boldsymbol{\theta}} \langle O(\boldsymbol{\theta}) \rangle$ .

# Contexte VQAs : plateaux stériles ("barren plateau")

## Plateau Stérile

Des ansätze expérimentent un plateau stérile si la variance du gradient de la fonction coût décroît exponentiellement avec la taille du système :

$$\text{Var} [\partial_{\theta} \langle O(\boldsymbol{\theta}) \rangle] = \mathcal{O} \left( \frac{1}{b^n} \right) \quad (3)$$

avec  $n$  la taille du système et  $b > 1$ .

# Algèbre de Lie Dynamique (ALD) - contexte VQAs

## Définition ALD

Soit un ansatz de la forme  $U(\boldsymbol{\theta}) = \prod_{l=1}^L \prod_{k=1}^K e^{-i\theta_{lk} H_k}$ . Son algèbre de Lie dynamique  $\mathfrak{g}$  est l'espace vectoriel engendré par tous les commutateurs imbriqués possibles de  $\{iH_1, \dots, iH_K\}$  :

$$\mathfrak{g} = \text{span}_{\mathbb{R}} \langle \{iH_1, \dots, iH_K\} \rangle_{\text{Lie}} \subseteq \mathfrak{su}(2^n) \quad (4)$$

où  $\langle S \rangle_{\text{Lie}}$  note la fermeture de Lie de  $S$ .  $\mathfrak{g}$  est un sous-algèbre de  $\mathfrak{su}(2^n)$ .

# Algèbre de Lie Dynamique (ALD) - contexte VQAs

*Exemple : calcul de la fermeture de Lie de  $\{iX, iY\}$*

$$[iX, iY] = iX \cdot iY - iY \cdot iX = -XY + YX = -XY - XY = -2XY = -2iZ$$

# Algèbre de Lie Dynamique (ALD) - contexte VQAs

*Exemple : calcul de la fermeture de Lie de  $\{iX, iY\}$*

$$[iX, iY] = iX \cdot iY - iY \cdot iX = -XY + YX = -XY - XY = -2XY = -2iZ$$

$$[iX, iX] = 0 \cdot I,$$

$$[iX, iY] = -2iZ,$$

$$[iX, iZ] = 2iY,$$

$$[iY, iX] = 2iZ,$$

$$[iY, iY] = 0 \cdot I,$$

$$[iY, iZ] = -2iX,$$

$$[iZ, iX] = -2iY,$$

$$[iZ, iY] = 2iX,$$

$$[iZ, iZ] = 0 \cdot I.$$



# Algèbre de Lie Dynamique (ALD) - contexte VQAs

*Exemple : calcul de la fermeture de Lie de  $\{iX, iY\}$*

$$[iX, iY] = iX \cdot iY - iY \cdot iX = -XY + YX = -XY - XY = -2XY = -2iZ$$

$$[iX, iX] = 0 \cdot I,$$

$$[iX, iY] = -2iZ,$$

$$[iX, iZ] = 2iY,$$

$$[iY, iX] = 2iZ,$$

$$[iY, iY] = 0 \cdot I,$$

$$[iY, iZ] = -2iX,$$

$$[iZ, iX] = -2iY,$$

$$[iZ, iY] = 2iX,$$

$$[iZ, iZ] = 0 \cdot I.$$

*Pas de nouvel opérateur donc la fermeture de Lie est complète et l'algèbre de Lie correspondant est  $\text{span}_{\mathbb{R}} \langle \{iX, iY\} \rangle_{\text{Lie}} = \{iX, iY, iZ\} = \mathfrak{su}(2)$ .*

# Groupe de Lie Dynamique (GLD) - contexte VQAs

*Exemple précédent : calcul de la fermeture de Lie de  $\{iX, iY\}$*

*La fermeture de Lie est complète et l'algèbre de Lie correspondant est  $\text{span}_{\mathbb{R}} \langle \{iX, iY\} \rangle_{\text{Lie}} = \{iX, iY, iZ\} = \mathfrak{su}(2)$ .*

*Passage au groupe :  $\{iX, iY\}$  permettent d'écrire n'importe quelle évolution dans le Groupe de Lie Dynamique (GLD)  $SU(2)$  comme un produit fini de rotations  $e^{-i\Phi X}$  et  $e^{-i\Phi Y}$ .*

# Groupe de Lie Dynamique (GLD) - contexte VQAs

## Définition : GLD

Le groupe de Lie Dynamique  $\mathcal{G}$  d'un circuit de la forme

$U(\boldsymbol{\theta}) = \prod_{l=1}^L \prod_{k=1}^K e^{-i\theta_{lk} H_k}$  est déterminé par son algèbre de Lie dynamique  $\mathfrak{g}$  :

$$\mathcal{G} = e^{\mathfrak{g}} \equiv \{e^{iA} / iA \in \mathfrak{g}\} \quad (4)$$

$\mathcal{G}$  correspond à tous les unitaires implémentables par un circuit de la forme

$$U(\boldsymbol{\theta}) = \prod_{l=1}^L \prod_{k=1}^K e^{-i\theta_{lk} H_k}.$$

Pour tout  $V \in \mathcal{G}$ , il existe au moins un set de paramètres  $\boldsymbol{\theta}$  (pour un nombre fini de couches  $L$ ) tels que  $U(\boldsymbol{\theta}) = V$ .

# Groupe de Lie Dynamique (GLD) - contexte VQAs

## Définition : représentation adjointe de $\mathfrak{g}$

Soit un opérateur  $iG_\gamma$  dans la base de  $\mathfrak{g}$ , sa *représentation adjointe* est obtenue via l'application  $\Phi_{\mathfrak{g}}^{ad} : \mathfrak{g} \longrightarrow \mathbb{R}^{\dim(\mathfrak{g}) \times \dim(\mathfrak{g})}$  définie par

$$\left(\Phi_{\mathfrak{g}}^{ad}(iG_\gamma)\right)_{\alpha\beta} \equiv f_{\alpha\beta}^\gamma = \text{Tr} [iG_\gamma [(iG_\alpha), (iG_\beta)]] \quad (4)$$

La connaissance des représentations adjointe des vecteurs de la base d'observable  $iG_I$  (de taille  $\dim(\mathfrak{g})$ ), est suffisante pour obtenir la représentation de chaque élément de  $\mathfrak{g}$ .

# Groupe de Lie Dynamique (GLD) - contexte VQAs

Définition : représentation adjointe de  $\mathcal{G}$

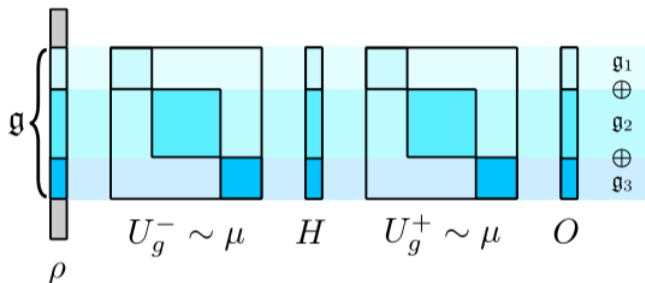
Application linéaire  $\Phi_{\mathcal{G}}^{Ad} : \mathfrak{g} \rightarrow \text{GL}(\mathbb{R}^{\dim(\mathfrak{g})}) \subset \mathbb{R}^{\dim(\mathfrak{g}) \times \dim(\mathfrak{g})}$  définie du groupe  $\mathcal{G}$  vers le groupe des opérateurs linéaires inversibles  $\text{GL}(\mathbb{R}^{\dim(\mathfrak{g})})$  par

$$\Phi_{\mathcal{G}}^{Ad}(U = e^{iA}) = e^{i\bar{A}} \quad (4)$$

pour tout  $iA \in \mathfrak{g}$  (ou tout  $U \in \mathcal{G}$ ), avec  $\bar{A} \equiv \Phi_{\mathfrak{g}}^{ad}(A)$ .

Permet d'évaluer l'action de n'importe quel unitaire  $U \in \mathcal{G}$  sur n'importe quel observable  $G_{\alpha}$  de la base de  $\mathfrak{g}$  :

$$U^{\dagger} G_{\alpha} U = \sum_{\beta} \left( \Phi_{\mathcal{G}}^{Ad}(iG_{\gamma}) \right)_{\alpha\beta} G_{\beta} \quad (5)$$



$$\text{Var } \partial \langle O \rangle = \sum_{\alpha} \frac{\|\rho_{\mathfrak{g}_{\alpha}}\|_F^2 \|H_{\mathfrak{g}_{\alpha}}\|_K^2 \|O_{\mathfrak{g}_{\alpha}}\|_F^2}{d_{\mathfrak{g}_{\alpha}}^2}$$

Référence : Fontana et al., *The Adjoint Is All You Need : Characterizing Barren Plateaus in Quantum Ansätze*, 2024.

# Correction d'erreurs

# Code correcteur quantique

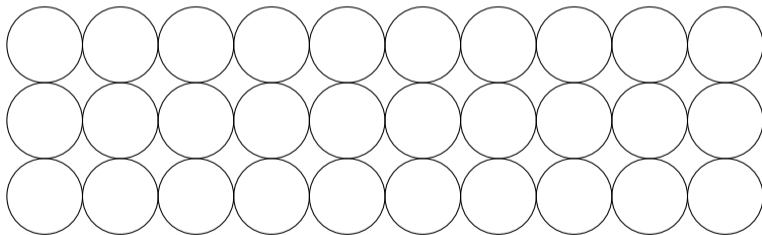
## Nécessité de la correction d'erreur

Les ordinateurs quantiques dont on dispose actuellement sont fortement bruités. Par conséquent, l'information obtenue ne peut être fiable que si elle est corrigée : c'est le but de la **correction d'erreur quantique**, qui s'inspirent sur les codes correcteurs d'erreur classiques qui existe déjà.



# Problème d'empilement compact

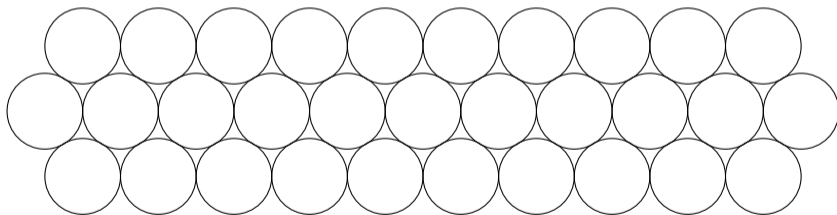
Comment placer le maximum de sphères solides dans un volume donné ? Ou inversement, comment organiser un nombre fixé de sphères solides de manière à ce qu'elles occupent un volume minimal ?



**Empilement non compact**

# Problème d'empilement compact

Comment placer le maximum de sphères solides dans un volume donné ? Ou inversement, comment organiser un nombre fixé de sphères solides de manière à ce qu'elles occupent un volume minimal ?

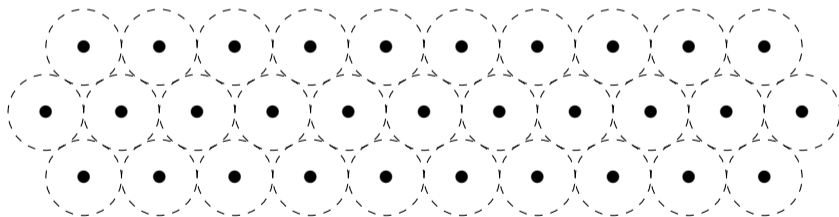


**Empilement compact**

# Lien entre correction d'erreur et empilement compact

## Code correcteur et espace métrique

Un code correcteur (classique) peut être vu comme un sous ensemble  $C$  d'un espace métrique  $(X, d)$ .

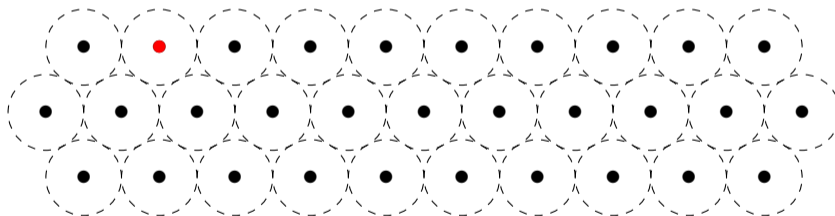


● = éléments de  $C$ , c'est à dire les messages possibles

# Lien entre correction d'erreur et empilement compact

## Code correcteur et espace métrique

Un code correcteur (classique) peut être vu comme un sous ensemble  $C$  d'un espace métrique  $(X, d)$ .

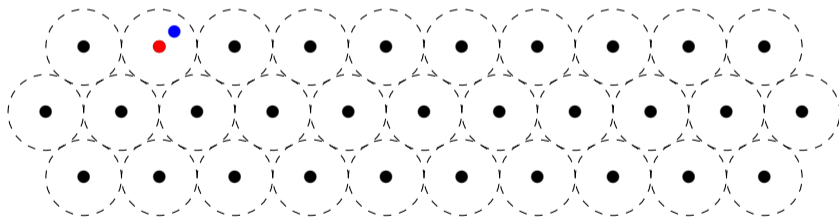


● = Message émis

# Lien entre correction d'erreur et empilement compact

## Code correcteur et espace métrique

Un code correcteur (classique) peut être vu comme un sous ensemble  $C$  d'un espace métrique  $(X, d)$ .

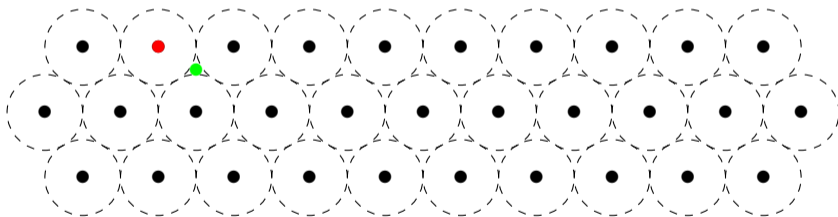


● = Erreur **correctible**

# Lien entre correction d'erreur et empilement compact

## Code correcteur et espace métrique

Un code correcteur (classique) peut être vu comme un sous ensemble  $C$  d'un espace métrique  $(X, d)$ .



● = Erreur **détectable**, mais pas corrigeable

## Lien entre correction d'erreur et empilement compact

### Espace métrique quantique ?

Créer un code correcteur efficace revient à **empiler des sphère de manière compact dans un espace métrique**. La construction est d'autant plus simple que l'espace métrique considéré possède des symétries.

Si l'on peut généraliser cette notion au paradigme quantique, on peut alors généraliser la construction de code correcteur quantique.

# Espace métrique quantique

## Métrique quantique

On appelle **métrique quantique** sur un espace de Hilbert  $\mathcal{H}$  toute filtration de  $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ , c'est à dire toute famille  $\{\mathcal{V}_t\}_{t \in \mathbb{R}_+}$  de sous-espaces de  $\mathcal{L}(\mathcal{H})$  vérifiant de « bonnes » propriétés dont la croissance au sens de l'inclusion.  $(\mathcal{H}, \{\mathcal{V}_t\})$  est alors appelé espace métrique quantique.

Référence : Greg Kuperberg, Nik Weaver. *A von Neumann algebra approach to quantum metrics*, American Mathematical Society, 2012.



# Graphe métrique quantique

## Graphe métrique quantique

On peut définir une métrique quantique (dont l'indice  $t$  est discret) à partir d'un sous-espace  $\mathcal{E}$  de  $\mathcal{L}(\mathcal{H})$  que l'on appelle *espace d'erreur*. Cette métrique est alors appelée **graphe métrique quantique** et permet, intuitivement, de mesurer les erreurs dans un message reçu en comptant le nombre d'arrête séparant le message reçu de celui qui a été émis.

# Graphe métrique quantique de type Lie

## Graphe métrique quantique de type Lie

Si de plus  $\mathcal{E}$  s'exprime en fonction d'une représentation d'une algèbre de Lie, alors on peut montrer que la structure du graphe métrique quantique est la même que celle du « diagramme de poids » de cette représentation. Donc dans ce cas, **on connaît parfaitement la géométrie de l'espace métrique**, et on peut donc appliquer les méthodes classiques d'empilement compact.

Référence : Christopher J. Bumgardner. *Codes in  $W^*$ -metric Spaces : Theory and Examples*, PhD thesis, University of California, 2011.

# Conclusion

# Conclusion

- Grande variété d'applications, notamment en informatique quantique : algorithmes variationnels et correction d'erreur, mais aussi synthèse de circuits, réseaux de neurones...
- Structure algébrique plus adaptée à l'informatique quantique que l'algèbre linéaire, qui elle est plus adaptée à l'informatique classique
- Paradigme fécond pour trouver de nouvelles applications de l'informatique quantique

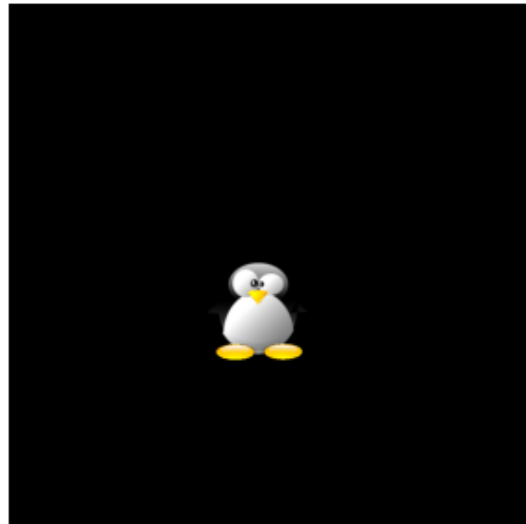
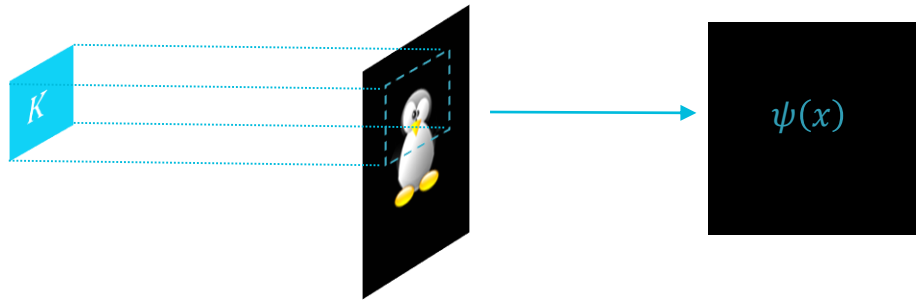


# QUANTUM GROUP CONVOLUTION FOR GEOMETRY-INFORMED DEEP LEARNING

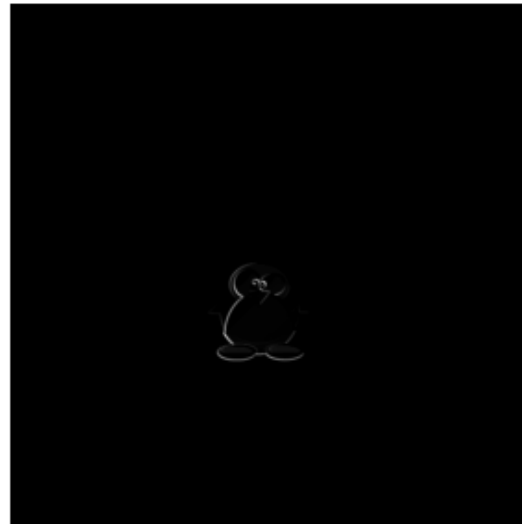
Frédéric **BARBARESCO**  
Quantum Algorithms & Computing  
Segment Leader  
THALES

# 2D-Convolution and Translation Equivariance

$$\forall x \in \mathbb{Z}^2, \quad \psi(x) = (I \star K)(x) = \sum_{y \in \mathbb{Z}^2} K(x - y)I(y)$$



Original image



Convolution feature map with Sobel filter

$K: \mathbb{Z}^2 \rightarrow \mathbb{R}$  convolution kernel

$I: \mathbb{Z}^2 \rightarrow \mathbb{R}$  is the functional representation of the image

$L_h$ : translation operator for  $h \in \mathbb{Z}^2$ , so that  $L_h(f)(x) = f(x - h)$

**Feature maps built from convolution kernels transform consistently with the original image translation**

$$L_h \psi(x) = (L_h I \star K)(x)$$

**CNN success for image processing tasks comes from this equivariance property, combined with the use of local filters, weights sharing, and pooling steps.**

**Convolution definition can also be seen as a discretized integral**

$$\psi(x) = (I \star K)(x) = \int_{\mathbb{R}^2} K(x - y)I(y) dx dy$$

**→ We want to generalize to other transforms than translations**

# Group Actions

## Group theory provides the mathematical tools to deal with structured transforms

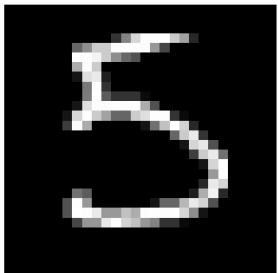
- Transformations are represented by elements  $g$  of a group  $G$
- Transformations  $g \in G$  act on the data  $X$  as  $g \circ X$

## Examples of Groups of 2D-plane transforms

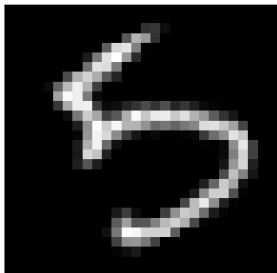
- Translation group  $\mathbb{R}^2$ :  $T_x \oplus_{\mathbb{R}^2} T_y = T_{x+y}$ , for  $x, y \in \mathbb{R}^2$
- Rotation group  $SO(2)$ :  $R_{\theta_1} \oplus_{SO(2)} R_{\theta_2} = R_{\theta_{1,2}}$ , for  $\theta_1, \theta_2 \in [0, 2\pi]$  and  $\theta_{1,2} = \theta_1 + \theta_2 [2\pi]$
- Special Euclidean group  $SE(2)$ :  $H_{x,\theta_1} \oplus_{SE(2)} H_{y,\theta_2} = H_{R_{\theta_1}y+x, R_{\theta_{1,2}}}$  ( $SE(2) = \mathbb{R}^2 \ltimes SO(2)$ )

## Examples of actions on a single image

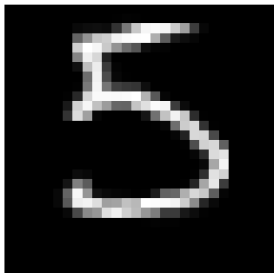
$\mathbb{R}^2$



$SO(2)$



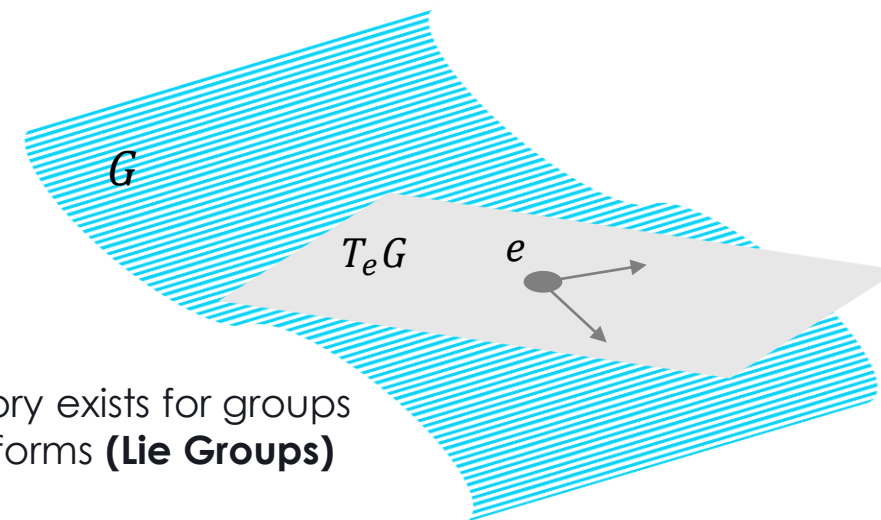
$SE(2)$



Evariste Galois 1811 -1832



Sophus Lie 1842 -1899



A very powerful theory exists for groups of continuous transforms (**Lie Groups**)

# Generalized Convolution

## Convolution operator can be generalized to generic groups of transforms

$$\forall g \in G, \quad \psi_G(g) = (f \star_G K)(g) = \int_G K(h^{-1}g)f(h)d\mu^G(h)$$

$K: G \rightarrow \mathbb{R}$  convolution kernel

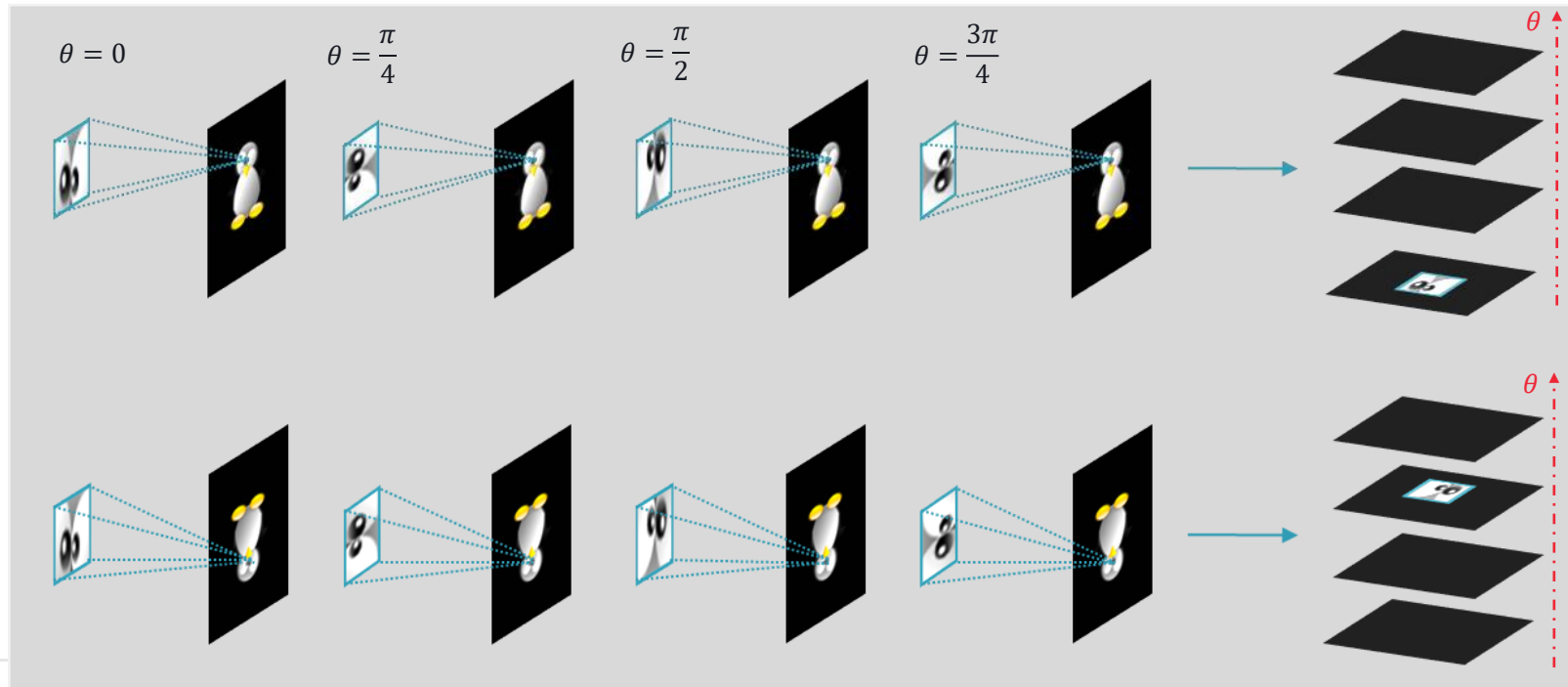
$f: G \rightarrow \mathbb{R}$  input feature map

$L_h$ : translation operator for  $h \in g$ , so that  $L_h(f)(g) = f(h^{-1}g)$

$\mu^G$ : Haar measure of the group  $G$

## Feature maps built from generalized convolutions are equivariant to the corresponding group action

$$L_h \psi_G(g) = (L_h f \star_G K)(g)$$



### Equivariance of an $SE(2)$ convolution operator

- Kernel is rotated and 2D convolution is performed as usual
- A stack of 2D feature maps is obtained, indexed by the rotation angle
- Rotation of the input translates into a shift in the stack of feature maps



# Quantum Computer Native Design for Lie Algebra Computation

## Quantum algorithms for group convolution, cross-correlation, and equivariant transformations

Grecia Castelazo, Quynh T. Nguyen, Giacomo De Palma, Dirk Englund, Seth Lloyd, Bobak T. Kiani

<https://arxiv.org/abs/2109.11330>

**Abstract:** Group convolutions and cross-correlations, which are equivariant to the actions of group elements, are commonly used in mathematics to analyze or take advantage of symmetries inherent in a given problem setting. Here, we provide efficient quantum algorithms for performing linear group convolutions and cross-correlations on data stored as quantum states. Runtimes for our algorithms are logarithmic in the dimension of the group thus offering an exponential speedup compared to classical algorithms when input data is provided as a quantum state and linear operations are well conditioned. Motivated by the rich literature on quantum algorithms for solving algebraic problems, our theoretical framework opens a path for quantizing many algorithms in machine learning and numerical methods that employ group operations.

SEE MaxEnt'22 Conference – Institut Henri Poincaré



[https://www.youtube.com/watch?v=WU0sZUH4yHE0&list=PL2943vWJNLIFyF4yzoB5AHMcF9ml\\_hZTq&index=8](https://www.youtube.com/watch?v=WU0sZUH4yHE0&list=PL2943vWJNLIFyF4yzoB5AHMcF9ml_hZTq&index=8)



## Quantum Algorithms for Linear Equivariant Transformations

Bobak T. Kiani

Joint work with Grecia Castelazo, Quynh The Nguyen, Dirk Englund, Giacomo De Palma, Seth Lloyd

Based on arXiv:2109.11330