Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA)

UE Informatique Quantique, ENSIIE

C. Grange, Décembre 2023

Plan

1. Algorithmes variationnels quantiques
2. QAOA
3. Conclusion

Plan

1 Algorithmes variationnels quantiques

2 QAOA

3 Conclusion

Introduction : une alternative hybride

- Shor, Grover, QFT... Avantages quantiques mais non implémentables aujourd'hui *(NISQ era)*
- D'où l'intérêt pour des algorithmes hybrides : palier les défaillances techniques quantiques en gardant certaines propriétés avantageuses

Introduction : une alternative hybride

- Shor, Grover, QFT... Avantages quantiques mais non implémentables aujourd'hui *(NISQ era)*
- D'où l'intérêt pour des algorithmes hybrides : palier les défaillances techniques quantiques en gardant certaines propriétés avantageuses

Definition (Algorithme hybride)

Un algorithme hybride est un algorithme qui utilise à la fois un ordinateur quantique et un ordinateur classique.

$\longrightarrow$ Une classe qui prend de l'ampleur : la classe des **algorithmes variationnels quantiques**.

Algorithmes variationnels quantiques (VQAs) (1)

Definition (Algorithme variationnel quantique)

Un algorithme variationnel quantique alterne entre l'exécution d'un **circuit quantique paramétré** par $\theta \in \mathbb{R}^d$ et l'optimisation de θ par un **solveur d'optimisation classique**. C'est une **heuristique**.

Type de problèmes traités : problèmes combinatoires à variables binaires non contraints :

$$\min_{x \in \{0,1\}^n} f(x)\,, \tag{1}$$

où f est polynomiale.

Algorithmes variationnels quantiques (VQAs) (2)

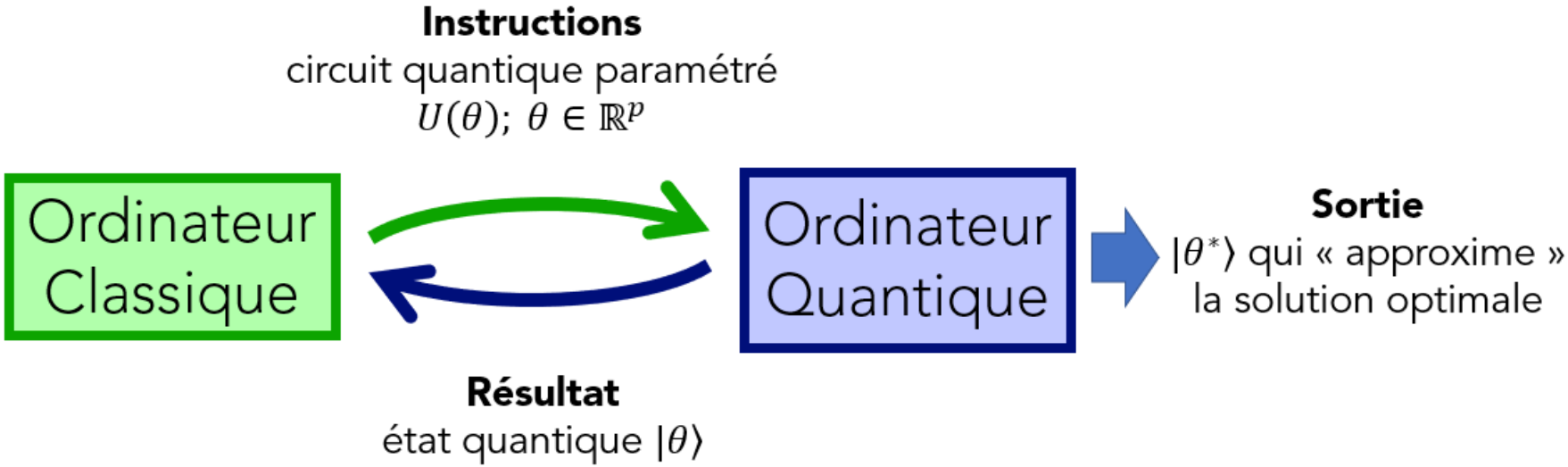


Figure – Schéma structurel d'un algorithme variationnel quantique

Applications : Chimie, Optimisation...

VQA : Partie quantique

La **partie quantique** d'un VQA est un circuit quantique paramétré par d réels, $\theta \in \mathbb{R}^d$.

- Circuit quantique = matrice unitaire $U \in \mathcal{M}_{2^n}(\mathbb{C})$
- Circuit quantique **paramétré** = fonction $U : \mathbb{R}^d \to \mathcal{M}_{2^n}(\mathbb{C})$ qui associe à chaque θ une matrice unitaire

On note $|\psi(\theta)\rangle = U(\theta)\,|0\rangle^{\otimes n}$ l'état en sortie.

VQA : Partie quantique

La **partie quantique** d'un VQA est un circuit quantique paramétré par d réels, $\theta \in \mathbb{R}^d$.

- Circuit quantique = matrice unitaire $U \in \mathcal{M}_{2^n}(\mathbb{C})$
- Circuit quantique **paramétré** = fonction $U : \mathbb{R}^d \to \mathcal{M}_{2^n}(\mathbb{C})$ qui associe à chaque θ une matrice unitaire

On note $|\psi(\theta)\rangle = U(\theta)\,|0\rangle^{\otimes n}$ l'état en sortie. Exemple :

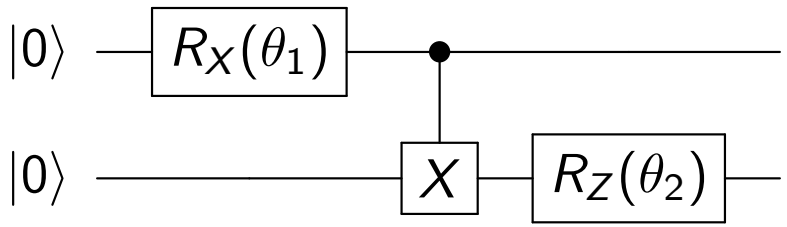


Figure – Circuit quantique paramétré par $\theta = (\theta_1, \theta_2) \in \mathbb{R}^2$.

VQA : Partie classique

Partie quantique produit un état quantique $|\psi(\theta)\rangle$ que l'on échantillonne

$\longrightarrow$ 1 mesure donne $x \in \{0,1\}^n$

$\longrightarrow$ N mesures donnent distribution de probabilité sur $\{0,1\}^n$

La **partie classique** d'un VQA se résume en deux points :

- Une fonction $g : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ à optimiser
- Un solveur classique qui optimise g

Objectif : choisir g et U tels que minimiser g *"revient à"* minimiser f.

Questions ? Quel circuit $U(\theta)$? Quelle fonction g ?

Exemple de circuit paramétré

Exemple de circuit sur 3 qubits, paramétré par $(\theta_1, \theta_2, \theta_3) \in \mathbb{R}^3$:

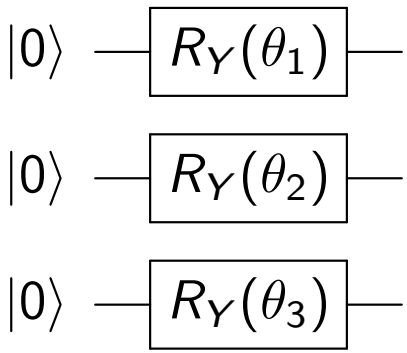


Figure – Circuit paramétré

$\longrightarrow$ permet de générer tous les états *produits* à 3 qubits.

Exemple de fonction à minimiser

Choix de fonction g le plus répandu :

$$g(\theta) = \sum_{x \in \{0,1\}^n} p_\theta(x) f(x)\,,$$

où $p_\theta(x) = |\langle x|\psi(\theta)\rangle|^2$ est la probabilité de mesurer x en sortie du circuit.

Exercice : Trouver l'expression de $g(\theta)$ pour le circuit $U(\theta) = R_Y(\theta_1) \otimes R_Y(\theta_2) \otimes R_Y(\theta_3)$ précédent en calculant $p_\theta(x)$ pour tout x.

Circuit + fonction à minimiser : choix

Quelques critères pour guider le choix...

- ...du **circuit paramétré** :
  - Facile à implémenter
  - Petit nombre de paramètres
  - Couverture de l'espace correcte/fine
- ...de la **fonction** g :
  - Continue (pour pouvoir optimiser "facilement")
  - Optimaux de g coïncident avec optimaux de f

Plan

1 Algorithmes variationnels quantiques

2 QAOA

3 Conclusion

Introduction à QAOA

Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA) :

- Proposé par Farhi et Goldstone en 2014 [4], sur Max-Cut
- Est un VQA
- Choix du circuit U : provient du théorème adiabatique
- Choix de la fonction g : moyenne

A Quantum Approximate Optimization Algorithm

Edward Farhi and Jeffrey Goldstone
Center for Theoretical Physics
Massachusetts Institute of Technology
Cambridge, MA 02139

Sam Gutmann

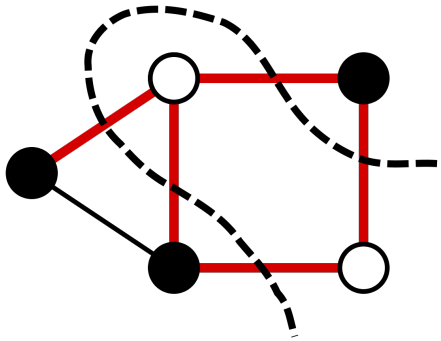
Abstract

We introduce a quantum algorithm that produces approximate solutions for combinatorial optimization problems. The algorithm depends on an integer $p \geq 1$ and the quality of the approximation improves as p is increased. The quantum circuit that implements the algorithm consists of unitary gates whose locality is at most the locality of the objective function whose optimum is sought. The depth of the circuit grows linearly with p times (at worst) the number of constraints.

Problème Max-Cut

Problème d'intérêt : Max-Cut.

Soit $\mathcal{G} = (V, E)$ un graphe à n sommets. On cherche la coupe maximale S.



Modèle mathématique :

$$\max_{x \in \{0,1\}^n} \sum_{(i,j) \in E} x_i(1 - x_j) + x_j(1 - x_i)\,,$$

où $x_i = 1$ ssi noeud i est dans S.

Question : Comment reformule-t-on notre problème ?

Théorème adiabatique

Système quantique à n qubits évolue selon l'équation de Schrödinger

$$i\frac{d}{dt}\left|\phi(t)\right\rangle = H(t)\left|\phi(t)\right\rangle ,$$

avec

- $H(t) \in \mathbb{C}^{2^n \times 2^n}$, matrice hermitienne appelée Hamiltonien du système à l'instant t
- vecteur d'état évolutif $\left|\phi(t)\right\rangle$ caractérise le système à l'instant t

Théorème adiabatique

Système quantique à n qubits évolue selon l'équation de Schrödinger

$$i\frac{d}{dt}\left|\phi(t)\right\rangle = H(t)\left|\phi(t)\right\rangle ,$$

avec

- $H(t) \in \mathbb{C}^{2^n \times 2^n}$, matrice hermitienne appelée Hamiltonien du système à l'instant t
- vecteur d'état évolutif $\left|\phi(t)\right\rangle$ caractérise le système à l'instant t

Definition (Théorème adiabatique)

Si l'Hamiltonien varie *suffisamment lentement* dans le temps, à chaque instant t le vecteur d'état évolutif $\left|\phi(t)\right\rangle$ reste toujours proche de l'état stable $\left|\phi_g(t)\right\rangle$, où l'état stable est le vecteur propre de $H(t)$ associé à la valeur propre minimale.

$\Longrightarrow$ on va encoder la solution optimale comme l'état stable d'un Hamiltonien (constant) H_P représentant notre problème (P)

QAOA schématisé

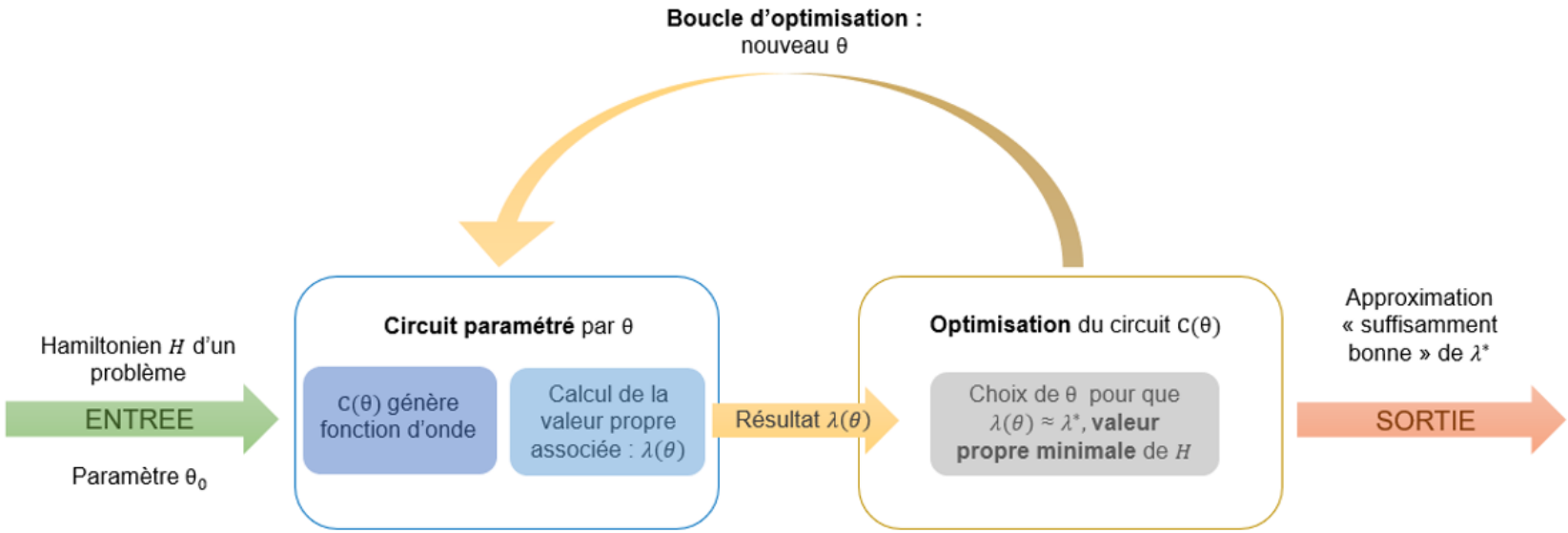


Figure – Représentation schématique de QAOA

Construction de H_P

Historiquement, les physiciens regardent le modèle d'Ising, équivalent à un modèle quadratique :

$$\min_{z\in\{-1,1\}^n} \sum_{i=1}^{n} h_i z_i + \sum_{i<j} J_{ij} z_i z_j \quad \longleftrightarrow \quad \min_{x\in\{0,1\}^n} \sum_{i,j=1}^{n} c_{ij} x_i x_j \qquad (P)$$

Modèle d'Ising

Modèle QUBO
(**Q**uadratic **U**nconstrained **B**inary **O**ptimization)

$\Longrightarrow$ L'Hamiltonien $H_P = \sum_{i=1}^{n} h_i Z_i + \sum_{i<j} J_{ij} Z_i \otimes Z_j$ correspond au problème (P)

Exercice : Trouver l'Hamiltonien du Max-Cut.

Exemple du problème Max-Cut

Problème Max-Cut :

- Formulation QUBO :

$$\max_x \sum_{(i,j)\in E} x_i(1-x_j) + x_j(1-x_i)\,, \quad \text{avec} \quad x \in \{0,1\}^n$$

- Modèle d'Ising :

$$\max_z \sum_{(i,j)\in E} \frac{1}{2}(1 - z_i z_j) \quad \text{, avec} \quad z \in \{-1,1\}^n$$

- Hamiltonien :

$$\sum_{(i,j)\in E} \frac{1}{2}(1 - Z_i \otimes Z_j)$$

Circuit paramétré U (1)

Circuit alterne entre 2 blocs, $e^{-i\gamma_i H_P}$ et $e^{-i\beta_i H_B}$:

- Porte unitaire associée à H_P, avec un angle $\gamma_i \in \mathbb{R}$:

$$e^{-i\gamma_i H_P} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}(-i)^k \gamma_i^k H_P^k$$

- Porte unitaire associée à $H_B = \sum_{i=1}^{n} X_i$ (où X_i = porte Pauli X sur qubit i), avec un angle $\beta_i \in \mathbb{R}$:

$$e^{-i\beta_i H_B} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}(-i)^k \beta_i^k H_B^k$$

Circuit paramétré U (2)

- **Paramètres :** $(\gamma, \beta) = (\gamma_1, \ldots, \gamma_p, \beta_1, \ldots, \beta_p) \in \mathbb{R}^{2p}$, où $p \in \mathbb{N}^*$ est un méta-paramètre
- **Circuit :**

$$U(\gamma, \beta) = e^{-i\beta_p H_B} e^{-i\gamma_p H_P} \ldots e^{-i\beta_1 H_B} e^{-i\gamma_1 H_P} |+\rangle^{\otimes n}$$

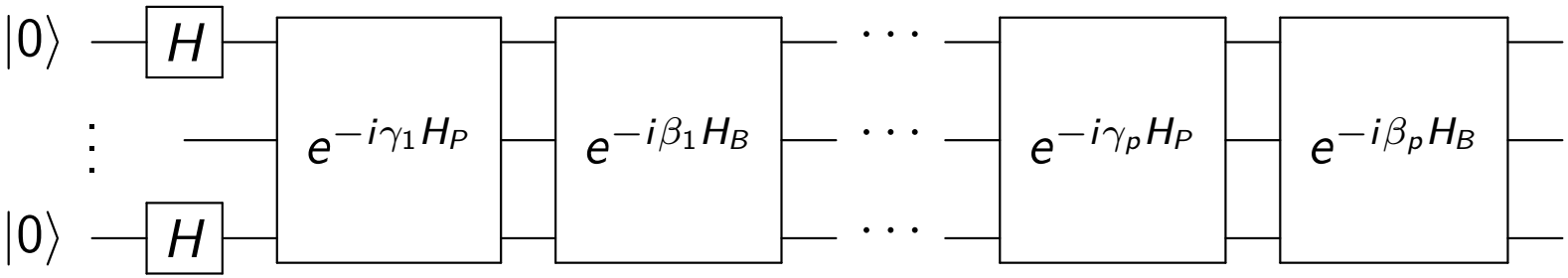


Figure – Circuit paramétré de QAOA.

$\Longrightarrow$ Pour p très grand, on *tend* vers l'application du théorème adiabatique

Recuit quantique

Le **recuit quantique** [7] repose sur le même principe !

- Etat initial : état stable de $H_B = \sum_{i=1}^{n} X_i$ facile à réaliser (X_i = porte Pauli X appliquée au qubit i)
- Variation de l'Hamilontien *total* : passage de H_B à H_P en τ étapes : $H(t) = (1 - \frac{t}{\tau})H_B + \frac{t}{\tau}H_P$
- Etat final : état stable de $H_P \Rightarrow$ solution du problème (P)

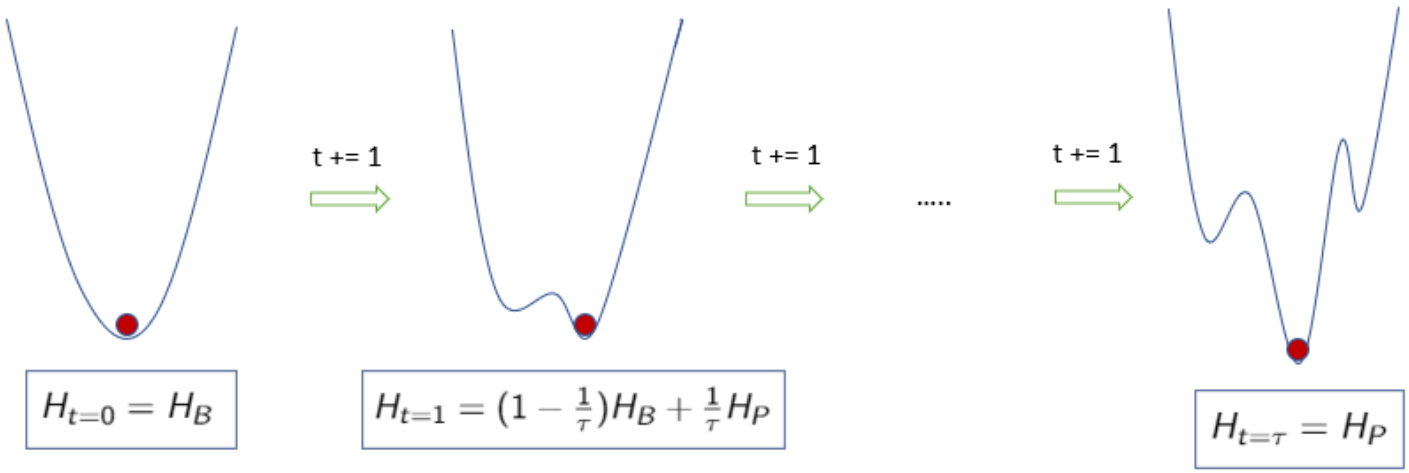


Figure – Déformation de l'Hamiltonien du système

Fonction g à optimiser

Choix de la valeur moyenne, appelée valeur moyenne de H_P :

$$g(\gamma, \beta) = \langle \psi(\gamma, \beta) | H_P | \psi(\gamma, \beta) \rangle$$

Definition (Valeur moyenne d'un observable)

Soit A un observable, i.e. matrice hermitienne dont les vecteurs propres forment une base orthonormée $\{u_a : a \in \mathcal{S}\}$, associés aux valeurs propres $\{\lambda_a : a \in \mathcal{S}\}$. On appelle sa *valeur moyenne* dans l'état $|\psi\rangle$ la quantité

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_{a \in \mathcal{S}} \lambda_a | \langle \psi | u_a \rangle |^2 .$$

Exercice : Montrer que g représente bien la valeur moyenne des valeurs de f pondérée par la distribution de probabilité.

Quelques propriétés de QAOA

Du côté théorique :

- Pas de preuve de convergence, ni de borne en général
- Max-Cut : Borne pour $p = 1$ pour graphes 3-réguliers [4], sans dépasser meilleures performances actuelles (algorithme de Goemans-Williamson [5])
- Preuves négatives pour certains types d'instances Max-Cut, même pour p grand [6, 3]
- Preuves de limites dues à la forme du circuit [2]

Quelques propriétés de QAOA

Du côté théorique :

- Pas de preuve de convergence, ni de borne en général
- Max-Cut : Borne pour $p = 1$ pour graphes 3-réguliers [4], sans dépasser meilleures performances actuelles (algorithme de Goemans-Williamson [5])
- Preuves négatives pour certains types d'instances Max-Cut, même pour p grand [6, 3]
- Preuves de limites dues à la forme du circuit [2]

Du côté empirique :

- Tests sur des petites instances uniquement : preuves empiriques limitées
- Améliorations des performances en modifiant U et/ou g [1, 8]
- Choix du solveur d'optimisation influe : optimisation globale pour éviter minima locaux [9]

Plan

1 Algorithmes variationnels quantiques

2 QAOA

3 Conclusion

Conclusion

Les algorithmes variationnels quantiques, et QAOA en particulier, sont des heuristiques de plus en plus étudiées.

$\Longrightarrow$ Machines quantiques actuelles empêchent de faire tourner sur grandes instances : conclusions seront tirées plus tard

$\Longrightarrow$ Tentatives de preuves théoriques commencent à arriver pour d'autres problèmes que Max-Cut

Conclusion

Les algorithmes variationnels quantiques, et QAOA en particulier, sont des heuristiques de plus en plus étudiées.

$\Longrightarrow$ Machines quantiques actuelles empêchent de faire tourner sur grandes instances : conclusions seront tirées plus tard
$\Longrightarrow$ Tentatives de preuves théoriques commencent à arriver pour d'autres problèmes que Max-Cut

Autres aspects à explorer :

- Reformulation du problème (P) : diminuer nombre portes du circuit
- Cas de problèmes contraints
- Transpilation intelligente
- ...

[1] P. K. Barkoutsos, G. Nannicini, A. Robert, I. Tavernelli, and S. Woerner. Improving variational quantum optimization using cvar. *Quantum*, 4 :256, 2020.

[2] S. Bravyi, A. Kliesch, R. Koenig, and E. Tang. Obstacles to variational quantum optimization from symmetry protection. *Physical review letters*, 125(26) :260505, 2020.

[3] E. Farhi, D. Gamarnik, and S. Gutmann. The quantum approximate optimization algorithm needs to see the whole graph : A typical case. *arXiv preprint arXiv :2004.09002*, 2020.

[4] E. Farhi, J. Goldstone, and S. Gutmann. A quantum approximate optimization algorithm. *arXiv preprint arXiv :1411.4028*, 2014.

[5] M. X. Goemans and D. P. Williamson. Improved approximation algorithms for maximum cut and satisfiability problems using semidefinite programming. *Journal of the ACM (JACM)*, 42(6) :1115–1145, 1995.

[6] M. B. Hastings. Classical and quantum bounded depth approximation algorithms. *arXiv preprint arXiv :1905.07047*, 2019.

[7] T. Kadowaki and H. Nishimori. Quantum annealing in the transverse ising model. *Physical Review E*, 58(5) :5355, 1998.

[8] L. Li, M. Fan, M. Coram, P. Riley, S. Leichenauer, et al. Quantum optimization with a novel gibbs objective function and ansatz architecture search. *Physical Review Research*, 2(2) :023074, 2020.

[9] G. Nannicini. Performance of hybrid quantum-classical variational heuristics for combinatorial optimization. *Physical Review E*, 99(1) :013304, 2019.