Algorithmes variationnels quantiques, un cas d'étude : QAOA.

Eric Bourreau[1], Camille Grange[1,2], Michael Poss[1], Valentina Pozzoli[2]

[1] LIRMM, Université de Montpellier, France

{eric.bourreau, camille.grange, michael.poss}@lirmm.fr

[2] SNCF DTIPG, Saint-Denis, France

{camille.grange,valentina.pozzoli}@sncf.fr

Mots-clés : *algorithmes quantiques, optimisation combinatoire, métaheuristiques, QAOA.*

1 Contexte

Depuis quelques années, les ordinateurs quantiques, imaginés par Richard Feynman dans les années 80, sont construits et en constante amélioration. Les promesses de résolutions de problèmes difficiles sur ces machines quantiques constituent alors une réalité tangible et fait grandir l'intérêt de l'informatique quantique dans plusieurs communautés scientifiques, notamment celle de l'optimisation combinatoire. Une des classes d'algorithmes quantiques qui peut être implémentée actuellement et dans les années à venir est la classe des algorithmes variationnels quantiques (VQAs). Il s'agit d'algorithmes hybrides, qui alternent entre une partie classique (solveur d'optimisation) et une partie quantique (circuit quantique dont la taille est ajustable).

Le but de cette présentation est de décrire mathématiquement le fonctionnement des algorithmes variationnels quantiques et de présenter certaines observations intéressantes tirées de ce formalisme. Quelques propriétés qui nous semblent importantes sont présentées puis illustrées sur le cas du VQA le plus connu, le Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA).

2 Algorithmes variationnels quantiques

Les algorithmes variationnels quantiques [3] sont des métaheuristiques qui traitent des problèmes d'optimisation combinatoire de la forme

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

où f est une fonction polynomiale. [1] Un VQA est constitué de deux parties, une partie quantique et une partie classique, qui s'échangent des informations et alternent successivement.

La partie quantique est un circuit quantique, défini par une matrice unitaire, paramétrée par d réels $\theta \in \mathbb{R}^d$. Ce circuit paramétré est une fonction continue $U : \mathbb{R}^d \to \mathcal{M}_{2^n}(\mathbb{C})$ qui associe à chaque θ une matrice unitaire qui s'applique sur n qubits. Une fois ce circuit exécuté sur l'ordinateur quantique, on échantillonne la distribution de probabilité sur l'espace de recherche $\{0,1\}^n$ en sortie.

La partie classique réalise l'optimisation sur θ suivante :

$$\min_{\theta \in \mathbb{R}^d} g(\theta)\,, \tag{2}$$

où la fonction $g : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$, dépendante de U et f, est définie de sorte à ce que le solveur d'optimisation classique cherche le ou les paramètres optimaux θ^* tels que la probabilité de mesurer une solution optimale de (1) est grande.

1. Observons que le problème est non-contraint.

3 Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA)

Nous étudions en particulier le cas du Quantum Approximate Optimization Algorithm [4] (QAOA) qui représente le VQA de référence pour résoudre des problèmes d'optimisation combinatoires, appliqué historiquement au problème Max-Cut. Il s'agit d'une sous-classe de VQAs fortement étudiée dans la littérature.

Le circuit quantique de QAOA est paramétré par $2p$ réels $(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}) = (\gamma_1, \ldots, \gamma_p, \beta_1, \ldots, \beta_p)$, où $p \in \mathbb{N}^*$ est un méta-paramètre, appelé *profondeur* du circuit. Le circuit quantique $U(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta})$ a la particularité de s'exprimer en fonction de f. Sa forme provient originellement du théorème adiabatique, et intéresse la communauté scientifique du fait qu'il ne peut pas être simulé efficacement par un ordinateur classique [5].

La fonction à optimiser g est choisie comme le coût moyen d'un état quantique produit par le circuit, autrement dit,

$$g(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}) = \sum_{x \in \{0,1\}^n} p_{(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta})}(x) f(x) \,, \tag{3}$$

où $p_{(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta})}(x)$ est la probabilité de mesurer la solution x en sortie du circuit $U(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta})$. Nous discuterons des propriétés mathématiques satisfaites par les définitions de g et de U propres à QAOA.

4 Tendances actuelles et perspectives

QAOA est un des algorithmes les plus étudiés dans la communauté des méta-heuristiques quantiques. Des travaux théoriques sont conduits pour mieux comprendre ses garanties, pour l'instant sans preuve de convergence ni de borne indiquant que QAOA dépassera un jour les heuristiques classiques actuelles. Il a même été prouvé que, pour des faibles profondeurs p, QAOA ne pourra pas dépasser les performances classiques [6], ou bien que QAOA sera battu classiquement pour certaines instances de Max-Cut pour n'importe quel p [2].

En parallèle, des expériences empiriques sont menées afin d'étudier QAOA, notamment en proposant une modification du circuit U et de la fonction g, ce qui aboutit à des améliorations de performances par rapport au QAOA initial [1, 7]. Des conclusions définitives de ces résultats pourront être tirées lorsque l'on sera en capacité de traiter des instances de grande taille, ce qui n'est pas encore le cas aujourd'hui.

Références

[1] Panagiotis Kl Barkoutsos, Giacomo Nannicini, Anton Robert, Ivano Tavernelli, and Stefan Woerner. Improving variational quantum optimization using cvar. *Quantum*, 4 :256, 2020.

[2] Sergey Bravyi, Alexander Kliesch, Robert Koenig, and Eugene Tang. Obstacles to variational quantum optimization from symmetry protection. *Physical review letters*, 125(26) :260505, 2020.

[3] Marco Cerezo, Andrew Arrasmith, Ryan Babbush, Simon C Benjamin, Suguru Endo, Keisuke Fujii, Jarrod R McClean, Kosuke Mitarai, Xiao Yuan, Lukasz Cincio, et al. Variational quantum algorithms. *Nature Reviews Physics*, 3(9) :625–644, 2021.

[4] Edward Farhi, Jeffrey Goldstone, and Sam Gutmann. A quantum approximate optimization algorithm. *arXiv preprint arXiv :1411.4028*, 2014.

[5] Edward Farhi and Aram W Harrow. Quantum supremacy through the quantum approximate optimization algorithm. *arXiv preprint arXiv :1602.07674*, 2016.

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

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