Approches hybrides quantiques/classiques pour l’optimisation combinatoire

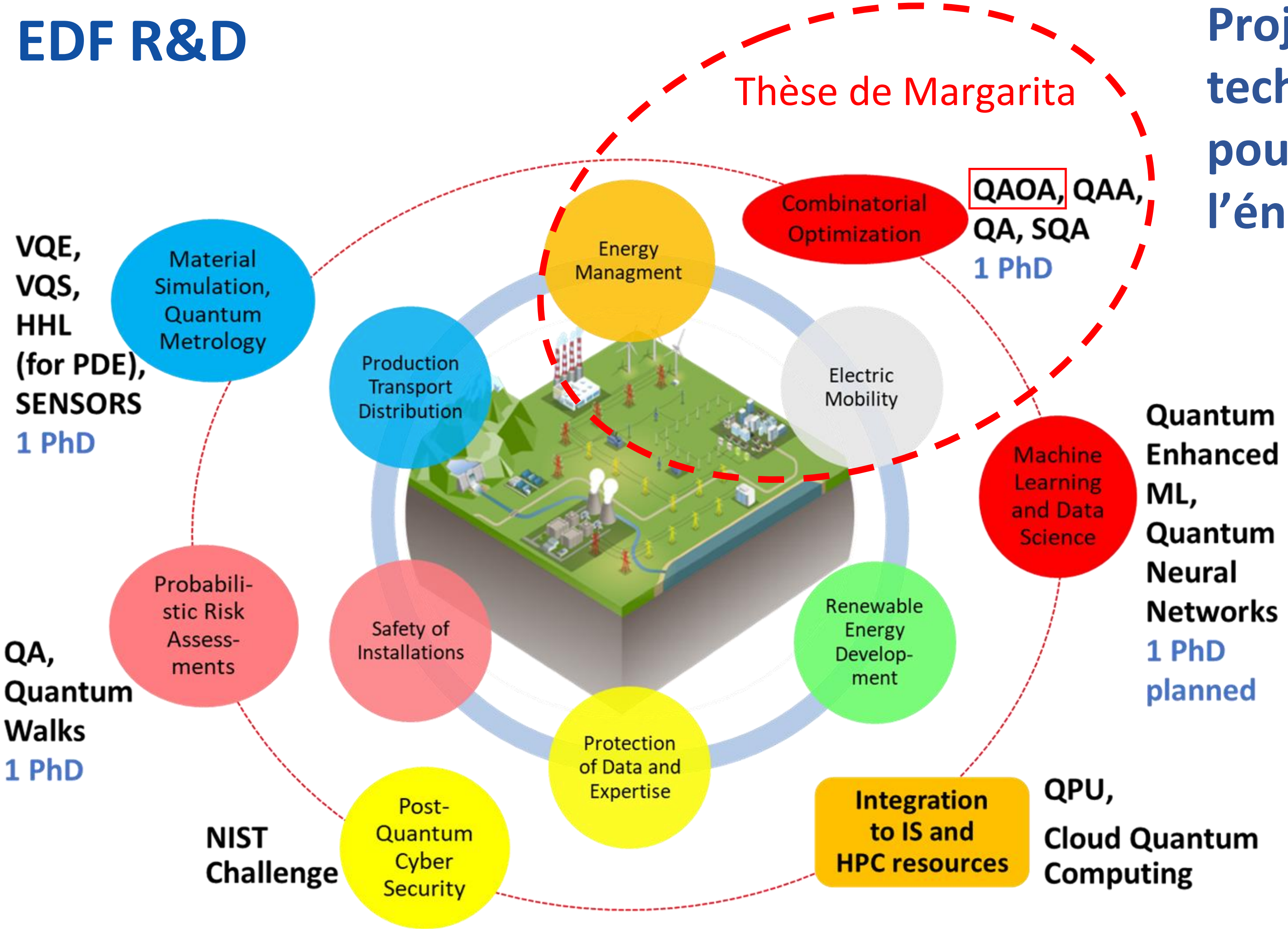
Applications à des problèmes de smart-charging de véhicules électriques

Margarita Veshcheserova, EDF R&D/LORIA
Marc Porcheron, EDF-R&D

Équipe MOCQUA
E. Jeandel, S. Perdrix

Loria
Laboratoire lorrain de recherche en informatique et ses applications

Uses-cases à l'étude à EDF R&D



Projet « Informatique et technologies quantiques pour les métiers de l'énergie»

- Nous recherchons des « avantages quantiques » potentiels dans ces domaines, en termes de performances et de consommation d'énergie
- En explorant NISQ, sans attendre LSQ !

Thèse de Margarita

- Octobre 2019-octobre 2022
- Co-encadrement EDF-R&D et LORIA/MOCQA (E. Jeandel et S. perdrix)
- Sujet : « Approches quantiques pour l’optimisation combinatoire, applications au management d’énergie»
- En pratique, on s’est concentré sur deux aspects :
  1. Industriel/applicatif : mise en œuvre et qualification de QAOA sur des problèmes métiers d’intérêt
  2. Académique/théorique : représentation et optimisation des circuits QAOA en ZX-Calculus

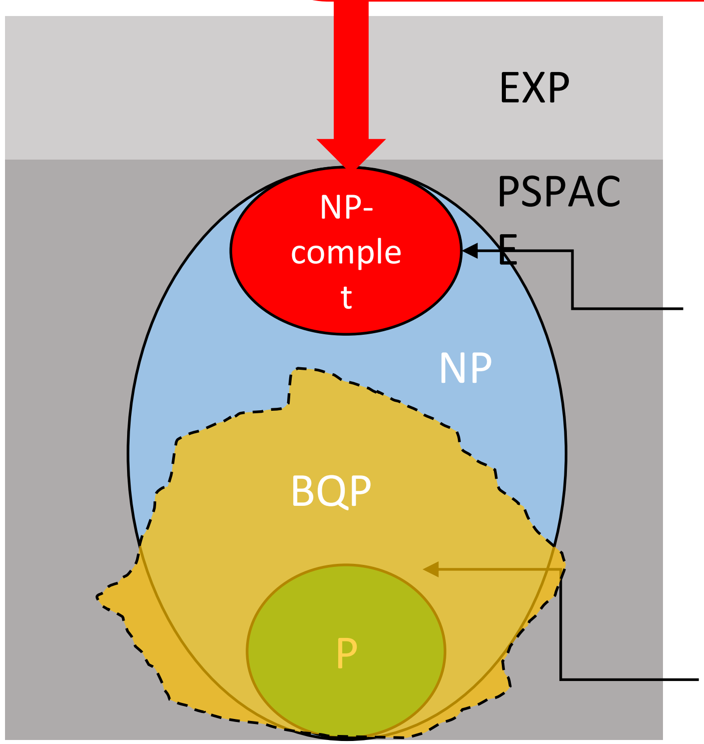
NB : la partie 2 n’est pas présentée ici.

Problématique : qualifier les approches quantiques sur nos problèmes

- **Identifier des problèmes d'optimisation difficile (discrète, combinatoire) pour lesquels il existe des approches quantiques disponibles, à minima sur le papier : QAOA, QAA, QA, SQA**
- **Réaliser des « preuves de concept » sur ces problèmes, sur des données réalistes**
- **Comparer les résultats aux meilleurs approches classiques disponibles**
  - Résolution exacte sur de petites instances
  - Résolution approchée par des algorithmes d'approximation polynomiaux, avec garantie sur la distance à l'optimum
  - Résolution heuristique, sans garantie sur la distance à l'optimum.

- Arrêts/démarrages des centrales de production (unit-commitment)
- Réacteurs nucléaires : placement des arrêts pour rechargement, planification des opérations de maintenance pendant les arrêts, permutation des grappes de contrôle, plan de rechargement
- Etudes Probabilistes de Sureté
- Logistique des centres d'appel
- Planification des tournées des agents
- **Optimisation des recharges/flexibilités des VE**
- …

EDF



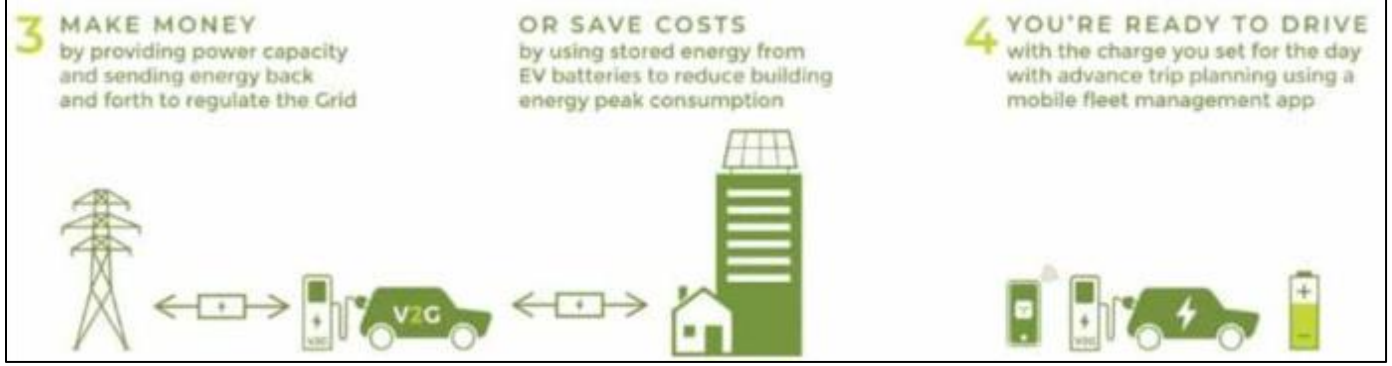
- **Optimisation discrète/combinatoire**
  - **Travelling salesman**
  - **Bin-packing**
  - **Job-shop scheduling**
  - **SAT**
  - **Knapsack …**
- **Programmation linéaire en nombre entiers**
- **….**

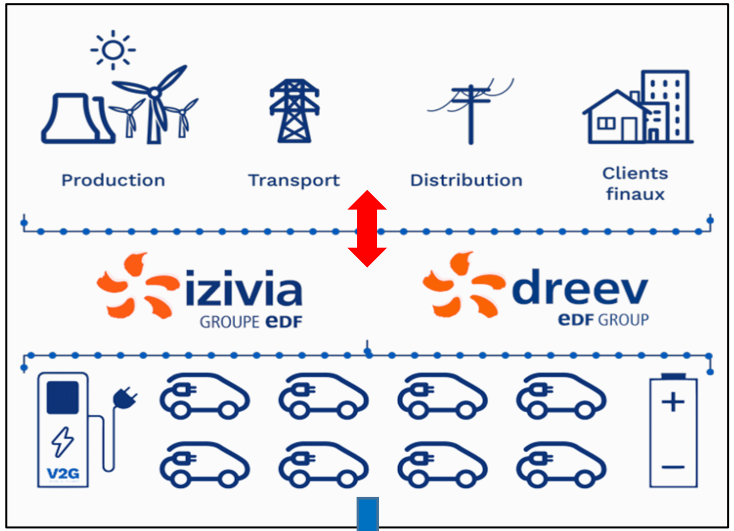
- Isomorphisme de graphes
- Factorisation des entiers/Logarithme discret

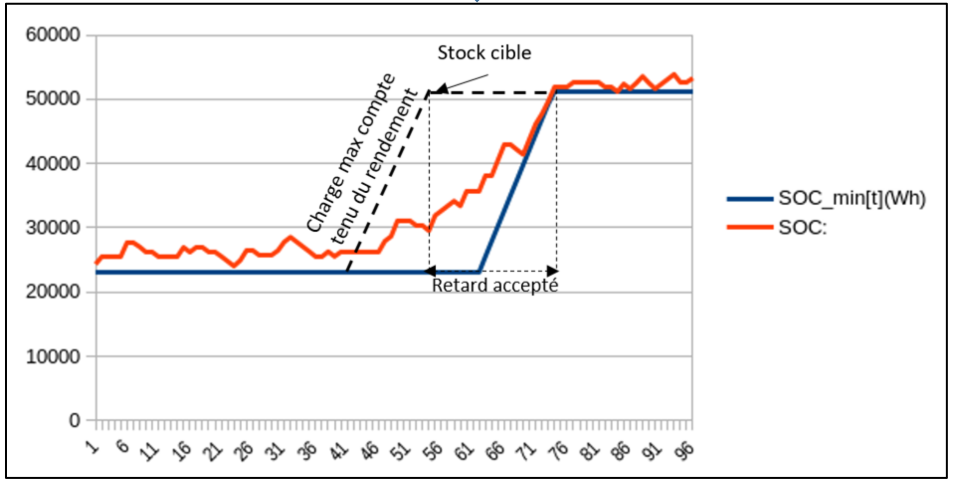
D'après [Aaronson 10]

Domaine métier considéré : smart-charging/vehicle to grid (V2G)

Principe : considérer les VE pas seulement comme une *demande* de puissance adressée au réseau (*charger*) mais aussi comme une *ressource* de stockage et de puissance pour le réseau (*stocker, décharger*)







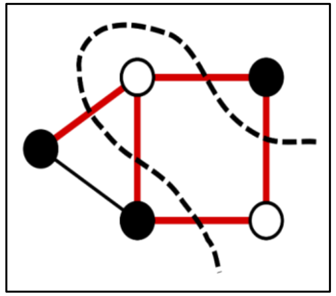
De nombreux problèmes d'optimisation difficiles : quand charger les véhicules et comment ? De combien de bornes de chargement avons-nous besoin et où les disposer ? …

Premier travaux (2019-2021) : QAOA pour deux problèmes de scheduling de VE sur des bornes de recharge

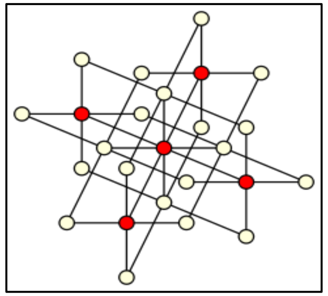
- Hypothèses : bornes identiques, pas de contraintes de ressources (ex. sur la puissance maximale disponible sur la station …), pas de préemption (une charge est nécessairement réalisée sur la même borne, sans interruption)
- Données utilisées : données publiques du réseau « Belib » à Paris, mai 2017 (3357 charges)

Problèmes considérés

- **(SC1) : minimisation du temps total de complétion de charges priorisées sur un ensemble de bornes**
  - Les charges sont connues par leur durée et munies d'une priorité tirée aléatoirement (véhicules d'intervention d'urgence > véhicules particuliers ...)
  - On veut minimiser la somme des temps de complétion des charges, pondérés par leur priorité
  - ⇒ Max-K-Cut sur un graphe complet pondéré (K=nombre de bornes)
  - **NP-Complet (PTAS sur une formulation alternative). Polynomial sans les priorités**



- **(SC2) Maximisation des non-recouvrements de charges, sous contrainte de groupe**
  - Les intervalles de charges (début des charges connus) sont répartis aléatoirement en groupes (véhicules d'intervention d'urgence, véhicules particuliers, flottes de différentes entreprises ...)
  - On veut déterminer le plus grand ensemble de charges ne se recouvrant pas, sous contrainte d'avoir au plus un véhicule chargé dans chaque groupe
  - ⇒ MIS dans le graphe d'union du graphe d'intervalles et du graphe « cluster » des groupes (ensemble de cliques disjointes).
  - **NP-Complet (pas de PTAS). Polynomial sans la contrainte de groupe (MIS de graphe d'intervalles)**



Mise en œuvre

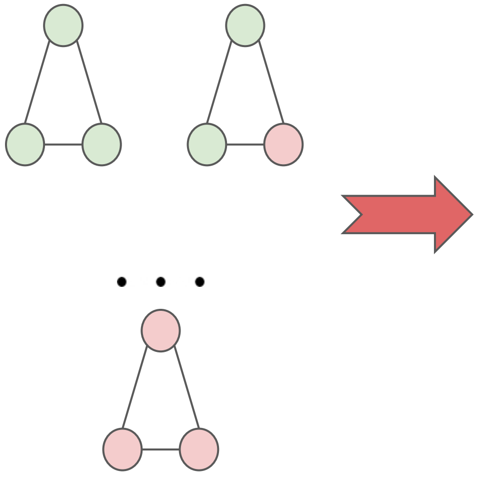
- **Extension de QAOA de Max-Cut à Max-K-Cut**
- **Implémentation a priori efficace de QAOA pour (SC2/MIS) sur la machine à atomes de Rydberg de Pasqal**
  - Le « rayon de blocage » détermine si les atomes interagissent entre eux en fonction de leur distance
  - ? le MIS est obtenu « naturellement » par le *ground state* de l'Hamiltonien en positionnant physiquement les atomes/qubits comme sommets d'un *graphe Unit-Disk* : une arrête entre deux sommets ssi leur distance dans le plan est inferieure à une borne donnée, caractéristique de la machine
- **Mais …**
  - **Le graphe (SC2) n'est pas UD en général, et décider si un graphe est UD et calculer sa représentation UD dans le plan sont eux mêmes des problèmes NP-Difficiles**
  - **? Utilisation d'heuristiques pour transformer le graphe (SC2) en UD-graph, sans garantie d'y parvenir (si on a pas trouvé de représentation UD au bout d'un temps fixé, on abandonne l'instance)**
  - **De plus, le UD-MIS a un PTAS → avantage quantique pas évident …**

Un premier bilan

- **Résultats encourageants obtenus sur de petites instances**
  - Jusqu'à une trentaine de VE : on fait ~aussi bien que les meilleurs algos classiques dédiés
  - Synthèse dans *: C. Dalyac, L. Henriet, E. Jeandel, W. Lechner, S. Perdrix, M. Porcheron et M. Veshchezerova, «Qualifying quantum approaches for hard industrial optimization problems. A case study in the field of smart-charging of electric vehicles » European Physical Journal EPJ Quantum Technol., vol. 8, n° 112, 2021*
- **Difficulté à passer à l'échelle sur les machines actuelles**
  - Les problème doivent être mis sous forme « QUBO », i.e. quadratique en variables binaires et sans contraintes
  - Nos problèmes industriels sont le plus souvent contraints et en variables mixtes … et très grands
    - Les variables continues doivent être discrétisées et remplacées par leurs expansions binaires → très nombreuses variables binaires supplémentaires
    - Les contraintes doivent être relâchées et pénalisées dans la fonction de coût. Les pénalités optimales sont difficiles à déterminer et conduisent à de nombreux termes supplémentaires dans l'Hamiltonien ainsi qu'à de nouvelles variables d'écart à discrétiser
    - Comme alternative, on peut essayer de maintenir le système quantique dans l'espace admissible des solutions, en utilisant des *Hamiltoniens de mixing* spécifiques dont la mise en œuvre n'est pas évidente
- **Une variable binaire ~1 qubit … non compatible NISQC !!!**

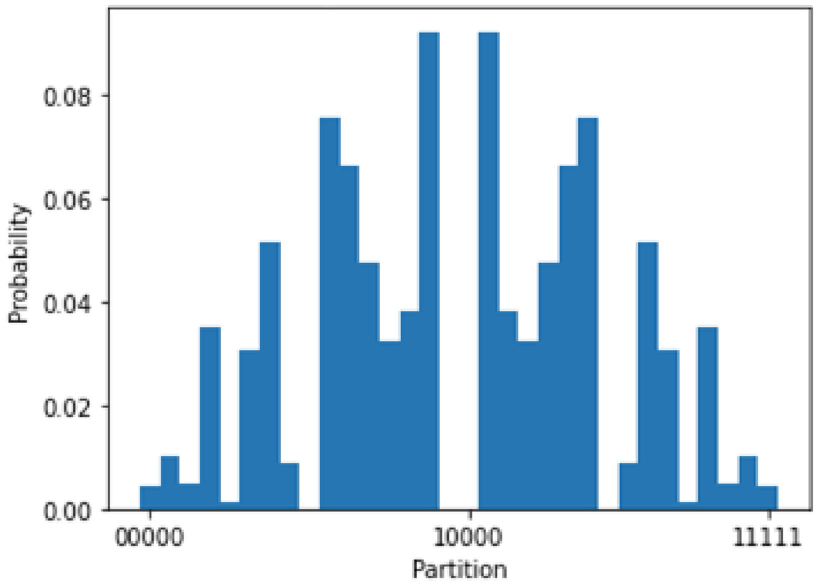
QAOA: main idea

- Encode all possible solutions in vectors of the computational basis



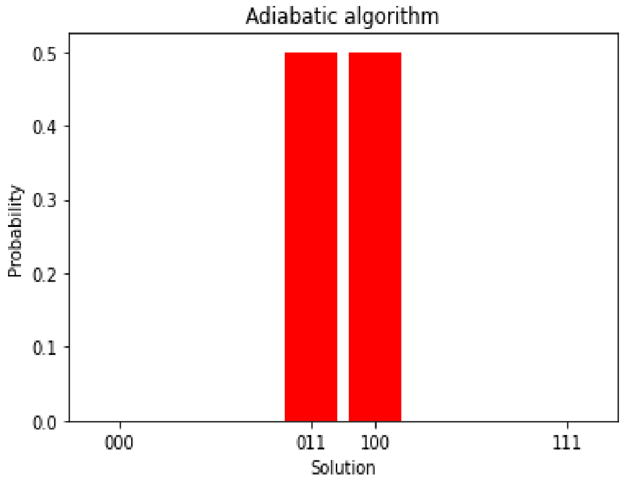
$$|000\rangle$$
$$|001\rangle$$
$$\cdots$$
$$|111\rangle$$

- Modify the quantum state, such that it has “bigger” probabilities on “better” solutions

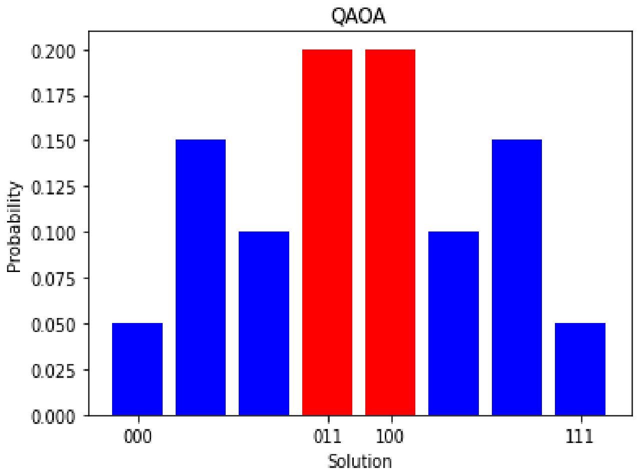


NISQ quantum algorithms for combinatorial optimization

- Adiabatic algorithm [1]
  - Find the exact solution
  - May have exponential runtime



- QAOA(Quantum approximate optimization algorithms) [2]
  - Find an approximate solution
  - Has polynomial runtime by definition



[1] T. Albash and D. Lidar. *Adiabatic Quantum Computing*. 2018

[2] E. Farhi, J. Goldstone, and S. Gutmann. *A Quantum Approximate Optimization Algorithm*. 2014.

QAOA (parametrized) state

$$|\psi(\gamma,\beta)\rangle = H_B(\beta_p)H_C(\gamma_p)\dots \boxed{H_B(\beta_1)H_C(\gamma_1)}\boxed{(\otimes^n|+\rangle)}$$

- Energy operator

$$C|i\rangle = f(i)|i\rangle$$

$$C = \sum_{1\leq i\leq n} h_i Z_i + \sum_{1\leq i<j\leq n} h_{i,j} Z_i Z_j$$

- Mixing operator

$$B = \sum_{i=1}^{n} X_i$$

- Hamiltonians

$$H_C(\gamma) = e^{-i\gamma C}$$

$$H_B(\beta) = e^{-i\beta B}$$

QAOA components for MaxCut

- Each vertex corresponds to one qubit
- Initial state $$|\psi_0\rangle = \bigotimes^n |+\rangle$$
- Mixing operator $$B = \sum_{i=1}^{n} X_i$$
- Phase operator $$C = \sum_{uv \in E} \frac{1}{2}(\mathbf{I} - Z_u Z_v)$$

QAOA steps

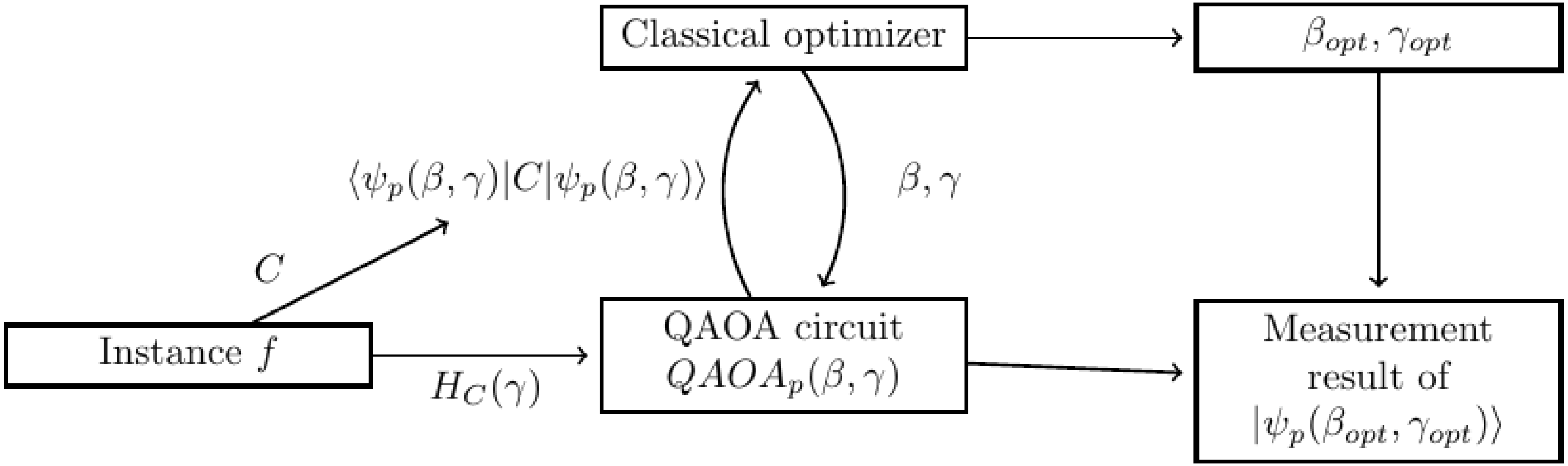
- **Encode** the instance of the problem (find a QUBO formulation)
- **Optimize** the parameters values in order to maximize the mean value of energy

$$\beta_{opt}, \gamma_{opt} = \arg\max \langle \psi(\beta, \gamma) | C | \psi(\beta, \gamma) \rangle$$

- **Sample** enough times to obtain the solution

ATTENTION: Sampling != Mean value computation

QAOA is a quantum-classical variational algorithm



Why do we expect it to work?

- Adiabatic theorem
  - for p big enough the final state is the ground state of the energy operator [1]
  - “Bang-bang” control is optimal [2]
- QAOA supremacy [4]

BUT IT CAN ALSO BE BEATEN BY CLASSICAL ALGORITHMS![3]

[1] E. Farhi, J. Goldstone, and S. Gutmann. *A Quantum Approximate Optimization Algorithm*. 2014.

[2] Z. Yang, A. Rahmani, A. Shabani, H. Neven, and C. Chamon. *Optimizing Variational Quantum Algorithms Using Pontryagin’s Minimum Principle*. 2017.

[3] S. Bravyi, A. Kliesch, R. Koenig, and E. Tang. *Obstacles to State Preparation and Variational Optimization from Symmetry Protection*. 2019

[4] E. Farhi and A. Harrow. *Quantum Supremacy through the Quantum Approximate Optimization Algorithm*. 2016.

Application of QAOA to the smart-charging problem

Goals:

- Establish an experimental protocol for QAOA for the smart-charging problem
- Experimentally study the performance of QAOA on the instances of interest

We need to specify **Encoding, Parameter Optimization** and **Sampling parts**

Encoding for Max-K-Cut

- State of the art solution [5]: Unary encoding

$$u \rightarrow |0, \ldots, 0, 1, 0, \ldots, 0\rangle_K$$

\+ Valid for any K

\- Takes more qubits

\- Compilation to a circuit is more difficult

- We suggest: Binary encoding

$$K = 2^k$$

$$u \rightarrow |0, 1, \ldots, 1\rangle_k$$

\+ Economical

\+ Every solution is feasible - No changes in mixing

\- Unclear how to generalize for all natural K

[5] S.A. Hadfield. *Quantum Algorithms for Scientific Computing and Approximate Optimization.* arxiv:1805.03265v1 2018

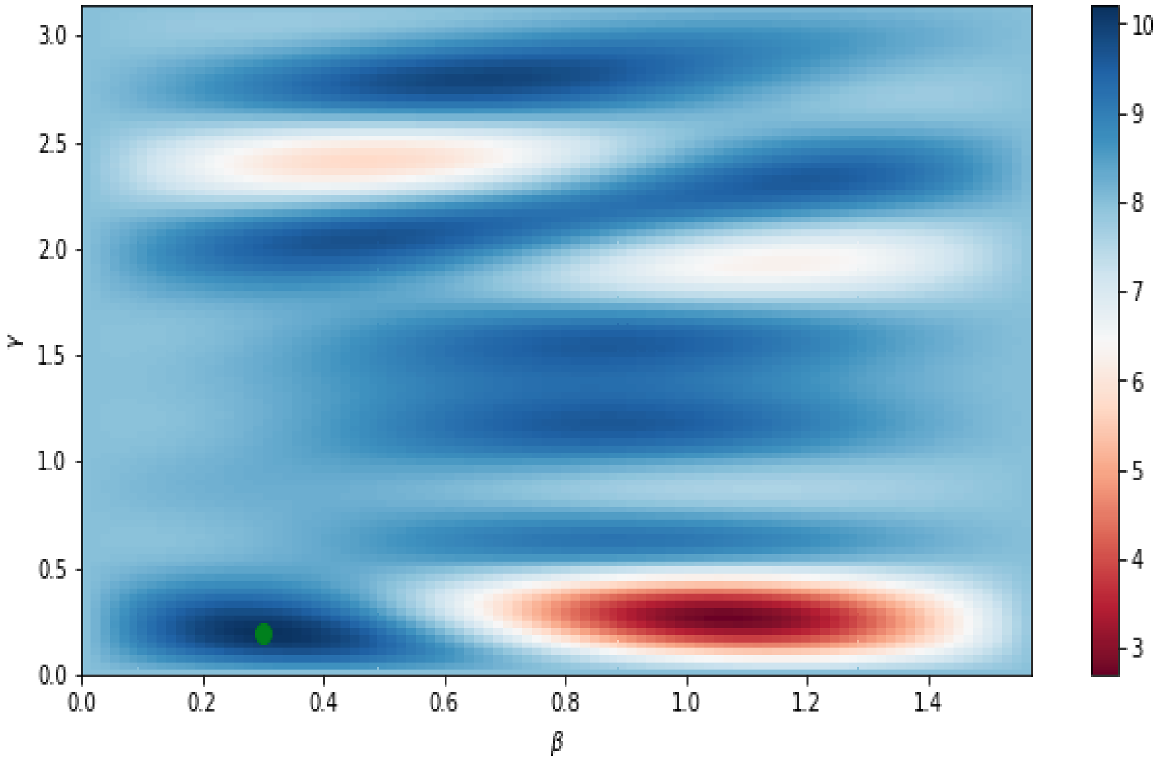
Parameter optimization (a real QAOA bottleneck!)

Goals:

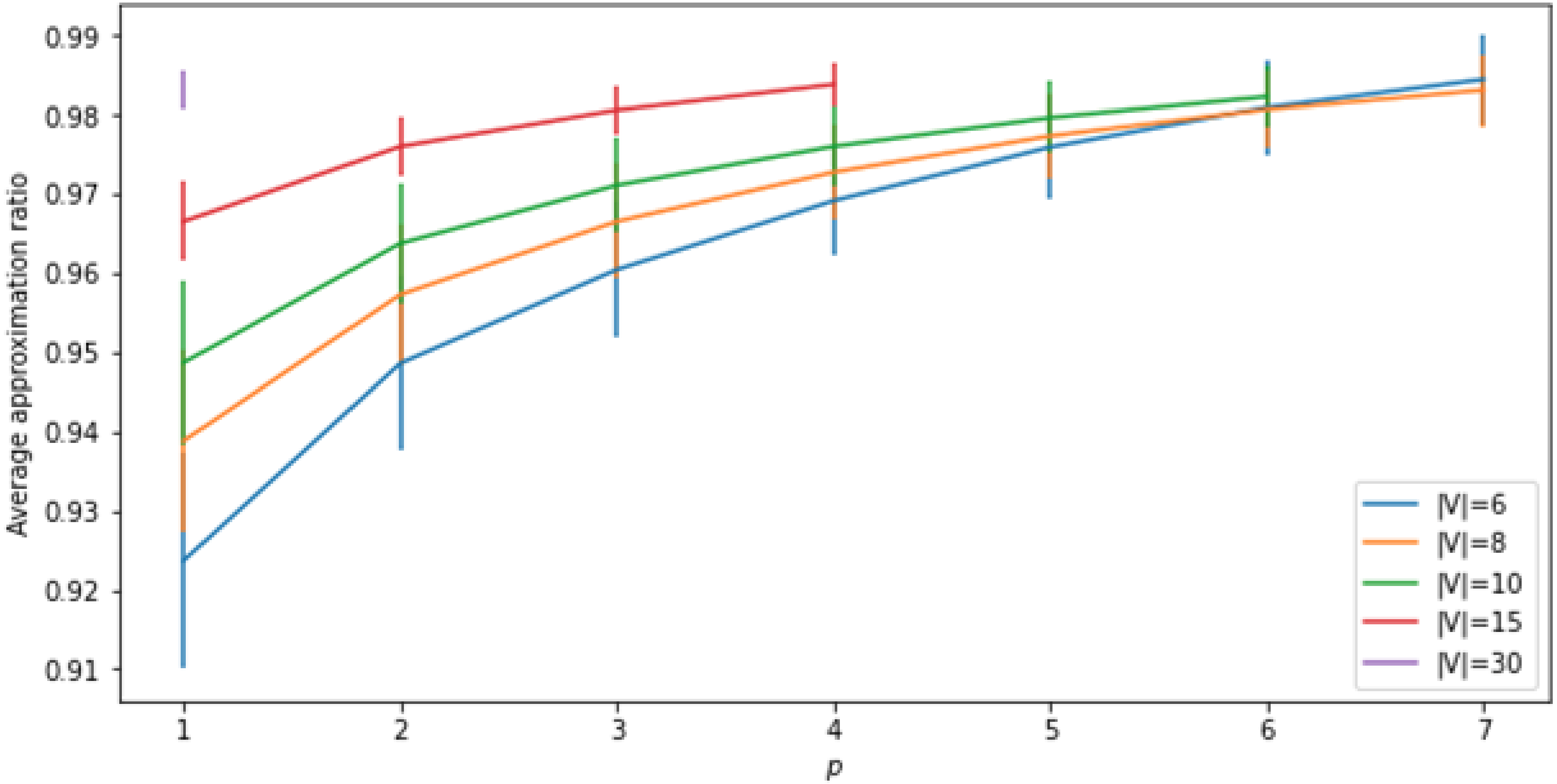
- How to compute the mean value: $\langle\psi(\beta,\gamma)|C|\psi(\beta,\gamma)\rangle \approx \frac{1}{M}\sum_{x\in X_M} C(x)$

For the depth 1 we have an analytical expression!

- How to optimize parameters (the function has a lot of local minima!) (Nelder-Mead + differential evolution)



Numerical results for the smart charging problem (K=2):



Results for p>1 were obtained on QLM

The results get better with the size of the instance!

Travaux en cours : approches hybrides quantiques/classiques pour de grands PLNE

Application à des problèmes de coloration de graphes (scheduling de charges, dimensionnement de stations …)

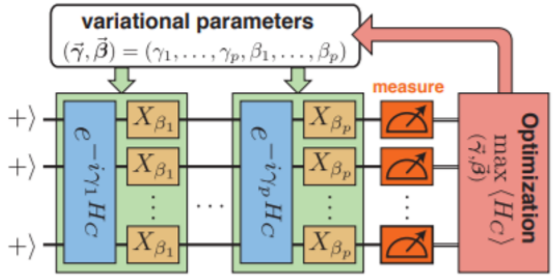
Démarche

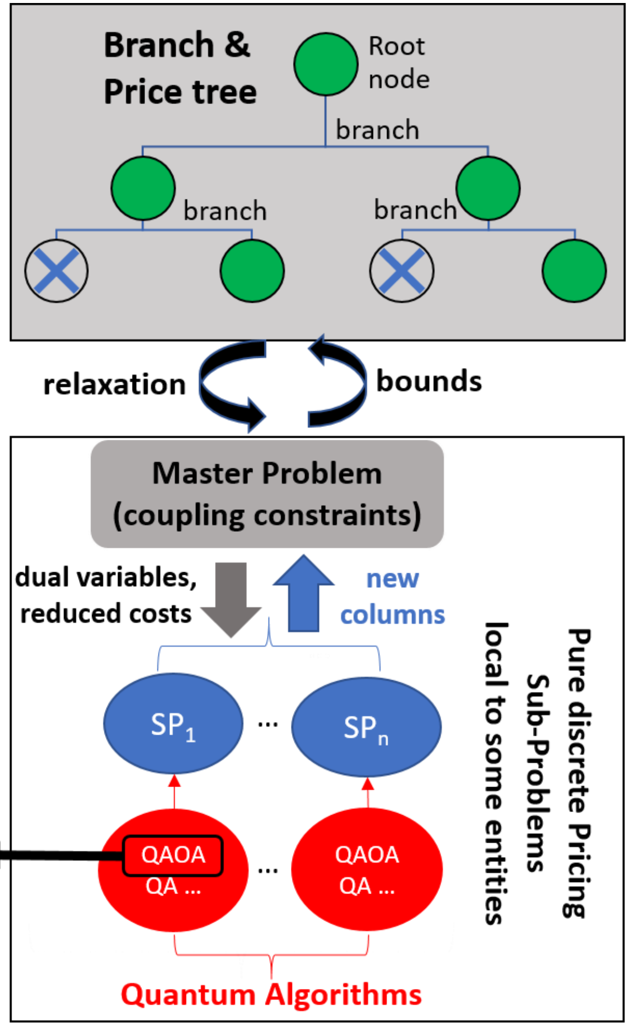
- **Ne pas attendre l'avènement du LSQ pour évaluer les approches quantiques sur nos problèmes**
- **Reformuler nos problèmes sous des formes a priori mieux adaptées aux approches quantiques disponibles**
  - Ex : passer d'une formulation mixte à une formulation purement discrète, en acceptant la perte de précision due à la discrétisation
- **Vers des approches hybrides : intégrer les algorithmes quantiques dans des schémas de décomposition classiques qui font souvent apparaitre des sous-problèmes bien adaptés à la résolution par des QPU dédiés**

Un “Branche & Price” générique hybride classique/quantique

- **Partie classique :** à chaque nœud, la relaxation du problème entier utilisé pour élaguer l'arbre est résolue par décomposition de Dantzig-Wolfe et « génération de colonnes », permettant de séparer le problème en problèmes indépendants « plus faciles » (ex. un sous-problème par VE)
- Les contraintes couplantes sont conservées dans le « Problème Maître», tandis que les « Sous-problèmes de Pricing » prennent la forme de purs problèmes combinatoires locaux à certains sous-systèmes (MIS, plus court chemin …), bien adaptés aux approches quantiques.

> **Partie quantique** : les algorithmes quantiques, par. ex **QAOA**, sont utilisés pour résoudre les Sous-problèmes de Pricing





Branch & Price

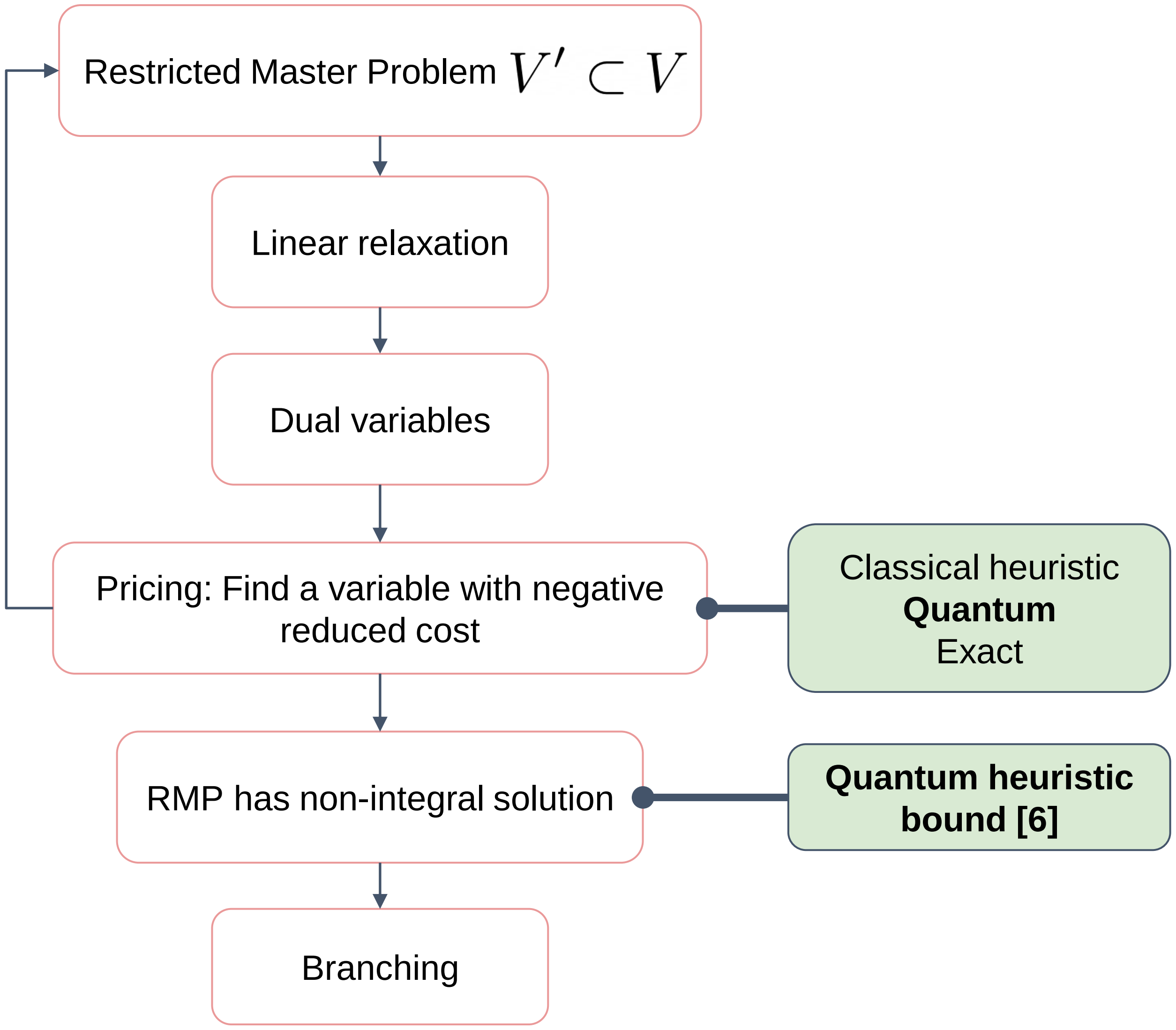
Optimization problem:

$$\min_{V} \sum_{v \in V} c_v \lambda_v$$

$$A\lambda = b$$

The set of variables V may be very big!

We tackle this issue with column generation



[6] M. Svensson, M. Andersson, M. Gronkvist, P. Vikstal, D. Dubhashi, G. Ferrini, G. Johansson: *A Hybrid Quantum-Classical Heuristic to solve large-scale Integer Linear Programs*. 2021.

Pricing should be modeled as QUBO

Examples:

- Maximum weighted independent set (in Graph coloring)
- Knapsack (in Binpacking)
- Shortest path (in network flow)

Interest:

- Another heuristic that is faster than exact algorithm

Solver QOptimize for combinatorial optimization

Direct QUBO formulation:

- Maximum independent Set
- Shortest Path (ongoing work)

QUBO is solved with **RQAOA**

Branch and Price:

- Graph Coloring
- Network flow problem (ongoing work)

RQAOA [8]

Motivation:

- Simulators allow to evaluate the scaling with **QAOA depth** (about p = 10)
- We want to evaluate the scaling with the **size of the instance** (gain insights about penalty, etc.)
- We need numerical results for bigger instances (current simulators are limited by 40 qubits)

Hint:

- **SAMPLING != MEAN VALUE COMPUTATION**
- We can use analytical formula for p=1 to eliminate variables!

[8] S. Bravyi, A. Kliesch, R. Koenig, and E. Tang. *Obstacles to State Preparation and Variational Optimization from Symmetry Protection*. 2019

RQAOA

Optimize QAOA parameters for (p=1)

β^*, γ^*

For every variable and pair of variables evaluate:

$$\sigma_i = \langle \psi(\beta^*, \gamma^*) | Z_i | \psi(\beta^*, \gamma^*) \rangle$$

$$\sigma_{i,j} = \langle \psi(\beta^*, \gamma^*) | Z_i Z_j | \psi(\beta^*, \gamma^*) \rangle$$

Choose biggest $|\sigma_i|, |\sigma_{i,j}|$

Fix Z_i to $s(\sigma_i)$ or $s(\sigma_{i,j}) Z_j$

Modify Ising Hamiltonian

Remove variable j

The distribution $|\psi(\beta^*, \gamma^*)\rangle$

favors solutions with good values of the objective function.

Graph coloring G(V, E):

Optimization problem [7]:

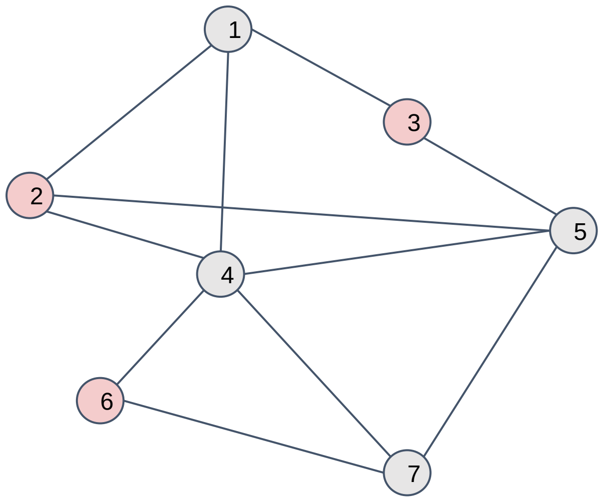
$$\min \sum_{s \in S} \lambda_s$$

$$\sum_{s \in S : v \in s} \lambda_s \geq 1, \quad \forall v \in V$$

$$\lambda_s \in \{0, 1\} \quad \forall s \in S$$

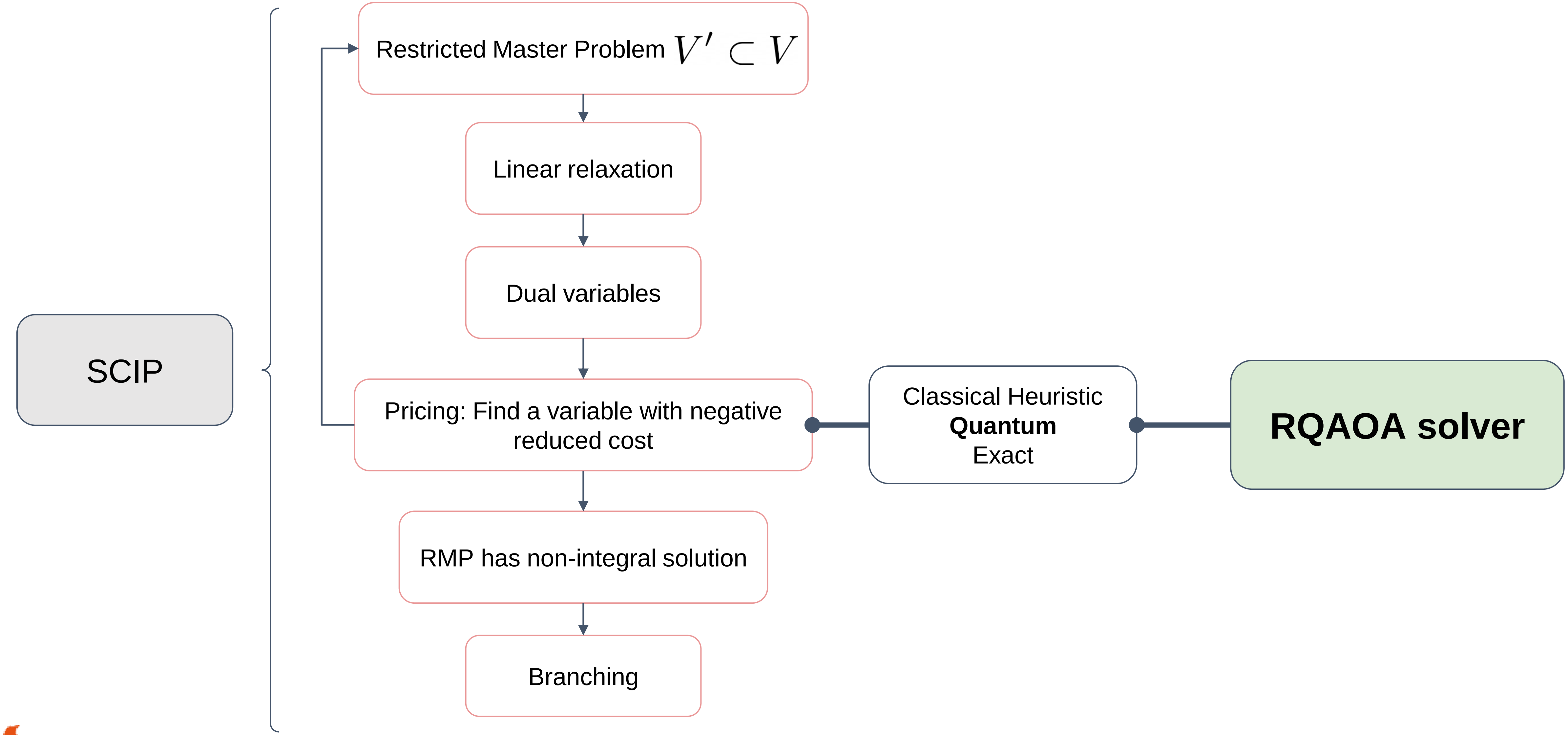
S is an ensemble of independent sets

Pricing is a Maximum Weighted Independent set problem!



[7] A. Mehrotra, M. A. Trick: *A Column Generation Approach for Graph Coloring*. 1996.

QOptimize with Branch and Price



Numerical results :

Maximum Independent Set:

On UD-MIS instances (100 - 1000VE) from smart charging we are at least at 98% of optimum!

Graph Coloring:

On sparse instances (density about 0.1) greedy already does well, on dense (density about 0.5) ones about 5-8%

[8] S. Bravyi, A. Kliesch, R. Koenig, and E. Tang. *Obstacles to State Preparation and Variational Optimization from Symmetry Protection.* 2019

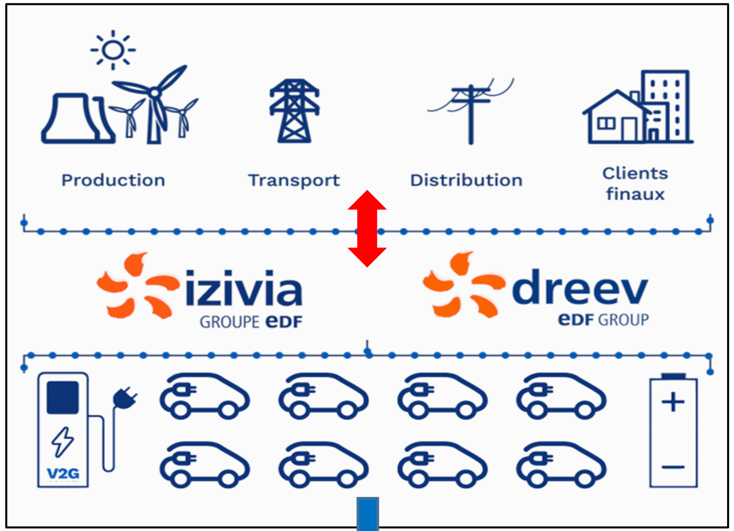
Publications

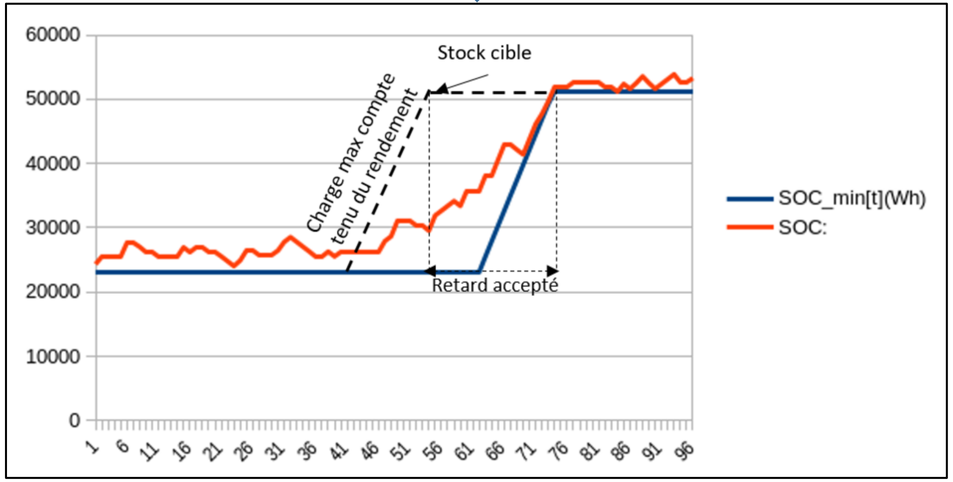
- Conference on Quantum Information Processing (QIP) 2021 – Poster **« Solving an energy management problem with QAOA »**
- EPJ Quantum Technology 2021– Article **« Qualifying quantum approaches for hard industrial optimization problems. A case study in the field of smart-charging of electric vehicles »**
- ROADEF 2021 – Talk **« Solving a smart-charging problem with the quantum algorithm QAOA on gate-based quantum computers »**
- FSCD 2022 - Article **« Addition and differentiation of ZX diagrams »**

Travaux futurs et conclusions

Application de l'approche hybride à un nouveau problème

- Optimiser la participation d'un ensemble de VE à la « réserve primaire » du réseau, tout en respectant les contraintes sur leur profil de charge : charge min/max, date au plus tard pour atteindre une charge cible …
- On doit décider à chaque pas de temps sur un horizon glissant quels VE se chargent/déchargent et à quelle puissance, tout en en satisfaisant une contrainte couplante de « réserve » demandée par RTE
- Méthodes actuelles (MILP) limitées à environ 1000 VE
- On voudrait traiter plusieurs dizaines, voire centaines de milliers de VE
- Reformulation compacte « Arc-Flow », reformulation étendue « Path-flow », décomposition de DW/Génération de colonnes/Branch and Price
- (R)QAOA utilisé pour résoudre des sous-problèmes de pricing de « plus court chemin », pour chaque VE





Conclusion … partielle et provisoire !

- QAOA et ses variantes semblent constituer des heuristiques pertinentes pour ce type de problèmes
- L'optimisation des paramètres de QAOA est *le* point difficile/clé
- L'hybridation avec des méthode classiques de décomposition semble une direction intéressante pour traiter des instances de grande taille
- Mais il est difficile de conclure dans la période NISQ : trop peu de qubits sur les machines disponibles
- La question du passage à l'échelle et d'un éventuel avantage quantique sur ce type de problèmes reste donc ouverte …

MERCI !