



DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

# La place des ordinateurs quantiques dits analogiques (D-Wave)

Principe, utilisation, comparaison et limitations

**Stéphane Louise**

`stephane.louise@cea.fr`

CEA, LIST

2-5 Novembre 2021, école QOR

- 1 Hamiltonien et propagateur
  - Fonction d'onde et espace d'état
  - Évolution des systèmes quantiques et théorème adiabatique
  - La mesure et la perte de l'information quantique
- 2 Application au calcul et à l'optimisation
  - Application au calcul
  - Principes et limitations de D-Wave
- 3 D-Wave utilisation : dépasser les contraintes
- 4 Le problème de cardinalité maximale et le D-Wave 2X
  - Résultats expérimentaux
- 5 Problèmes d'optimisation sur circuits quantiques
- 6 Remarques de conclusion

# Section 1

## Hamiltonien et propagateur

- Est une fonction  $\psi$  à valeurs complexes (scalaire si particule sans spin)
- $\overrightarrow{\psi(\vec{r}, t)}$   $\rightarrow |\psi(t)\rangle$  (Notation de Dirac)  $\psi(\vec{r}, t) = \hat{x} |\psi(t)\rangle$

- Est une fonction  $\psi$  à valeurs complexes (scalaire si particule sans spin)
- $\overrightarrow{\psi(\vec{r}, t)} \rightarrow |\psi(t)\rangle$  (Notation de Dirac)       $\psi(\vec{r}, t) = \hat{x} |\psi(t)\rangle$
- L'adjoint de la fonction d'onde  ${}^t |\psi(t)\rangle^*$       Noté  $\langle \psi(t)|$

- Est une fonction  $\psi$  à valeurs complexes (scalaire si particule sans spin)
- $\overrightarrow{\psi(\vec{r}, t)} \rightarrow |\psi(t)\rangle$  (Notation de Dirac)       $\psi(\vec{r}, t) = \hat{x} |\psi(t)\rangle$
- L'adjoint de la fonction d'onde  ${}^t |\psi(t)\rangle^*$       Noté  $\langle \psi(t)|$
- Produit scalaire :  $\langle \psi(t)|\psi(t)\rangle = |\psi(\vec{r}, t)|^2$

- Est une fonction  $\psi$  à valeurs complexes (scalaire si particule sans spin)
- $\overrightarrow{\psi(\vec{r}, t)} \rightarrow |\psi(t)\rangle$  (Notation de Dirac)       $\psi(\vec{r}, t) = \hat{x} |\psi(t)\rangle$
- L'adjoint de la fonction d'onde  ${}^t |\psi(t)\rangle^*$       Noté  $\langle \psi(t)|$
- Produit scalaire :  $\langle \psi(t)|\psi(t)\rangle = |\psi(\vec{r}, t)|^2$   
 $|\psi(\vec{r}, t)|^2$  interprété comme la densité de probabilité de présence de la particule associée à la fonction d'onde au point  $\vec{r}$  et au temps  $t$

- Est une fonction  $\psi$  à valeurs complexes (scalaire si particule sans spin)
- $\overrightarrow{\psi(\vec{r}, t)} \rightarrow |\psi(t)\rangle$  (Notation de Dirac)  $\psi(\vec{r}, t) = \hat{x} |\psi(t)\rangle$
- L'adjoint de la fonction d'onde  ${}^t |\psi(t)\rangle^*$  Noté  $\langle \psi(t)|$
- Produit scalaire :  $\langle \psi(t)|\psi(t)\rangle = |\psi(\vec{r}, t)|^2$   
 $|\psi(\vec{r}, t)|^2$  interprété comme la densité de probabilité de présence de la particule associée à la fonction d'onde au point  $\vec{r}$  et au temps  $t$
- Condition de normalisation :  $\forall t, \iiint |\psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} = 1$

- Est une fonction  $\psi$  à valeurs complexes (scalaire si particule sans spin)
- $\overrightarrow{\psi(\vec{r}, t)} \rightarrow |\psi(t)\rangle$  (Notation de Dirac)       $\psi(\vec{r}, t) = \hat{x} |\psi(t)\rangle$
- L'adjoint de la fonction d'onde  ${}^t |\psi(t)\rangle^*$       Noté  $\langle \psi(t)|$
- Produit scalaire :  $\langle \psi(t)|\psi(t)\rangle = |\psi(\vec{r}, t)|^2$   
 $|\psi(\vec{r}, t)|^2$  interprété comme la densité de probabilité de présence de la particule associée à la fonction d'onde au point  $\vec{r}$  et au temps  $t$
- Condition de normalisation :  $\forall t, \iiint |\psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} = 1$
- Les fonctions d'onde forment un espace vectoriel :  
 $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2$  est une fonction d'onde

- Est une fonction  $\psi$  à valeurs complexes (scalaire si particule sans spin)
- $\overrightarrow{\psi(\vec{r}, t)} \rightarrow |\psi(t)\rangle$  (Notation de Dirac)       $\psi(\vec{r}, t) = \hat{x} |\psi(t)\rangle$
- L'adjoint de la fonction d'onde  ${}^t |\psi(t)\rangle^*$       Noté  $\langle \psi(t)|$
- Produit scalaire :  $\langle \psi(t)|\psi(t)\rangle = |\psi(\vec{r}, t)|^2$   
 $|\psi(\vec{r}, t)|^2$  interprété comme la densité de probabilité de présence de la particule associée à la fonction d'onde au point  $\vec{r}$  et au temps  $t$
- Condition de normalisation :  $\forall t, \iiint |\psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} = 1$
- Les fonctions d'onde forment un espace vectoriel :  
 $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2$  est une fonction d'onde  
 $|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2|^2 = |\lambda_1|^2 |\psi_1|^2 + |\lambda_2|^2 |\psi_2|^2 +$

- Est une fonction  $\psi$  à valeurs complexes (scalaire si particule sans spin)
- $\overrightarrow{\psi(\vec{r}, t)} \rightarrow |\psi(t)\rangle$  (Notation de Dirac)       $\psi(\vec{r}, t) = \hat{x} |\psi(t)\rangle$
- L'adjoint de la fonction d'onde  ${}^t |\psi(t)\rangle^*$       Noté  $\langle \psi(t)|$
- Produit scalaire :  $\langle \psi(t)|\psi(t)\rangle = |\psi(\vec{r}, t)|^2$   
 $|\psi(\vec{r}, t)|^2$  interprété comme la densité de probabilité de présence de la particule associée à la fonction d'onde au point  $\vec{r}$  et au temps  $t$
- Condition de normalisation :  $\forall t, \iiint |\psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} = 1$
- Les fonctions d'onde forment un espace vectoriel :  
 $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2$  est une fonction d'onde  
 $|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2|^2 = |\lambda_1|^2 |\psi_1|^2 + |\lambda_2|^2 |\psi_2|^2 +$   
 $\lambda_1^* \lambda_2 \langle \psi_1|\psi_2\rangle + \lambda_1 \lambda_2^* \langle \psi_2|\psi_1\rangle$

- Est une fonction  $\psi$  à valeurs complexes (scalaire si particule sans spin)
- $\overrightarrow{\psi(\vec{r}, t)} \rightarrow |\psi(t)\rangle$  (Notation de Dirac)       $\psi(\vec{r}, t) = \hat{x} |\psi(t)\rangle$
- L'adjoint de la fonction d'onde  ${}^t |\psi(t)\rangle^*$       Noté  $\langle \psi(t)|$
- Produit scalaire :  $\langle \psi(t)|\psi(t)\rangle = |\psi(\vec{r}, t)|^2$   
 $|\psi(\vec{r}, t)|^2$  interprété comme la densité de probabilité de présence de la particule associée à la fonction d'onde au point  $\vec{r}$  et au temps  $t$
- Condition de normalisation :  $\forall t, \iiint |\psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} = 1$
- Les fonctions d'onde forment un espace vectoriel :  
 $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2$  est une fonction d'onde  
 $|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2|^2 = |\lambda_1|^2 |\psi_1|^2 + |\lambda_2|^2 |\psi_2|^2 +$

$\lambda_1^* \lambda_2 \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + \lambda_1 \lambda_2^* \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle \rightarrow$  Phénomène d'interférence

- Opérateur de position :  $\hat{x}/\hat{x} |\psi(t)\rangle = \psi(\vec{r}, t)$

- Opérateur de position :  $\hat{x}/\hat{x} |\psi(t)\rangle = \psi(\vec{r}, t)$
- Opérateur d'impulsion :  $\hat{p}/\hat{p} |\psi(t)\rangle = \psi(\vec{p}, t)$ ,  
en représentation spatiale  $\hat{p} = -i\hbar\nabla$

- Opérateur de position :  $\hat{x}/\hat{x} |\psi(t)\rangle = \psi(\vec{r}, t)$
- Opérateur d'impulsion :  $\hat{p}/\hat{p} |\psi(t)\rangle = \psi(\vec{p}, t)$ ,  
en représentation spatiale  $\hat{p} = -i\hbar\nabla \rightarrow$  transformée de Fourier

- Opérateur de position :  $\hat{x}/\hat{x} |\psi(t)\rangle = \psi(\vec{r}, t)$
- Opérateur d'impulsion :  $\hat{p}/\hat{p} |\psi(t)\rangle = \psi(\vec{p}, t)$ ,  
en représentation spatiale  $\hat{p} = -i\hbar\nabla \rightarrow$  transformée de Fourier
- Opérateur d'énergie: Hamiltonien  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$

- Opérateur de position :  $\hat{x}/\hat{x} |\psi(t)\rangle = \psi(\vec{r}, t)$
- Opérateur d'impulsion :  $\hat{p}/\hat{p} |\psi(t)\rangle = \psi(\vec{p}, t)$ ,  
en représentation spatiale  $\hat{p} = -i\hbar\nabla \rightarrow$  transformée de Fourier
- Opérateur d'énergie: Hamiltonien  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$
- Les quantités physiques observables sont associées à des opérateurs auto-adjoints:  
 $\hat{T}^\dagger = \hat{T}$  donc sont diagonalisables

- Opérateur de position :  $\hat{x}/\hat{x} |\psi(t)\rangle = \psi(\vec{r}, t)$
- Opérateur d'impulsion :  $\hat{p}/\hat{p} |\psi(t)\rangle = \psi(\vec{p}, t)$ ,  
en représentation spatiale  $\hat{p} = -i\hbar\nabla \rightarrow$  transformée de Fourier
- Opérateur d'énergie: Hamiltonien  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$
- Les quantités physiques observables sont associées à des opérateurs auto-adjoints:  $\hat{T}^\dagger = \hat{T}$  donc sont diagonalisables
  - $\exists \{t_0, t_1, \dots\}, \exists \{\psi_0, \psi_1, \dots\} / \hat{T} |\psi_0\rangle = t_0 |\psi_0\rangle, \hat{T} |\psi_1\rangle = t_1 |\psi_1\rangle, \dots$
  - Les  $\psi_i$  sont une base orthonormée,  $\forall i, j, \langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{i,j}$
  - L'ensemble des valeurs propres (spectre des valeurs) peut être continu (e.g.  $\hat{x}$ ), discret (pour les systèmes contraints), ou un mélange des deux

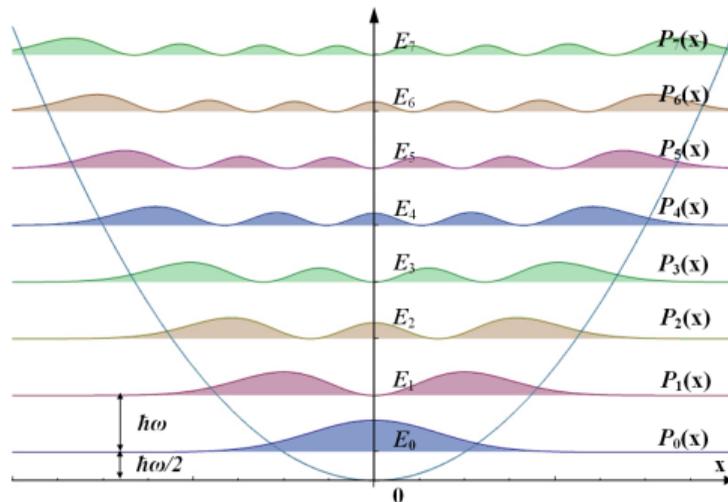
- Opérateur de position :  $\hat{x}/\hat{x} |\psi(t)\rangle = \psi(\vec{r}, t)$
- Opérateur d'impulsion :  $\hat{p}/\hat{p} |\psi(t)\rangle = \psi(\vec{p}, t)$ ,  
en représentation spatiale  $\hat{p} = -i\hbar\nabla \rightarrow$  transformée de Fourier
- Opérateur d'énergie: Hamiltonien  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$
- Les quantités physiques observables sont associées à des opérateurs auto-adjoints:  $\hat{T}^\dagger = \hat{T}$  donc sont diagonalisables
  - $\exists \{t_0, t_1, \dots\}, \exists \{\psi_0, \psi_1, \dots\} / \hat{T} |\psi_0\rangle = t_0 |\psi_0\rangle, \hat{T} |\psi_1\rangle = t_1 |\psi_1\rangle, \dots$
  - Les  $\psi_i$  sont une base orthonormée,  $\forall i, j, \langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{i,j}$
  - L'ensemble des valeurs propres (spectre des valeurs) peut être continu (e.g.  $\hat{x}$ ), discret (pour les systèmes contraints), ou un mélange des deux
- Évolution= équation de Schrödinger :  $\frac{d|\psi\rangle}{dt} = \left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\right) |\psi\rangle$

- Opérateur de position :  $\hat{x}/\hat{x} |\psi(t)\rangle = \psi(\vec{r}, t)$
- Opérateur d'impulsion :  $\hat{p}/\hat{p} |\psi(t)\rangle = \psi(\vec{p}, t)$ ,  
en représentation spatiale  $\hat{p} = -i\hbar\nabla \rightarrow$  transformée de Fourier
- Opérateur d'énergie: Hamiltonien  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$
- Les quantités physiques observables sont associées à des opérateurs auto-adjoints:  
 $\hat{T}^\dagger = \hat{T}$  donc sont diagonalisables
  - $\exists \{t_0, t_1, \dots\}, \exists \{\psi_0, \psi_1, \dots\} / \hat{T} |\psi_0\rangle = t_0 |\psi_0\rangle, \hat{T} |\psi_1\rangle = t_1 |\psi_1\rangle, \dots$
  - Les  $\psi_i$  sont une base orthonormée,  $\forall i, j, \langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{i,j}$
  - L'ensemble des valeurs propres (spectre des valeurs) peut être continu (e.g.  $\hat{x}$ ), discret (pour les systèmes contraints), ou un mélange des deux
- Évolution= équation de Schrödinger :  $\frac{d|\psi\rangle}{dt} = \left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\right) |\psi\rangle$
- Exemple : oscillateur harmonique 1D  
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

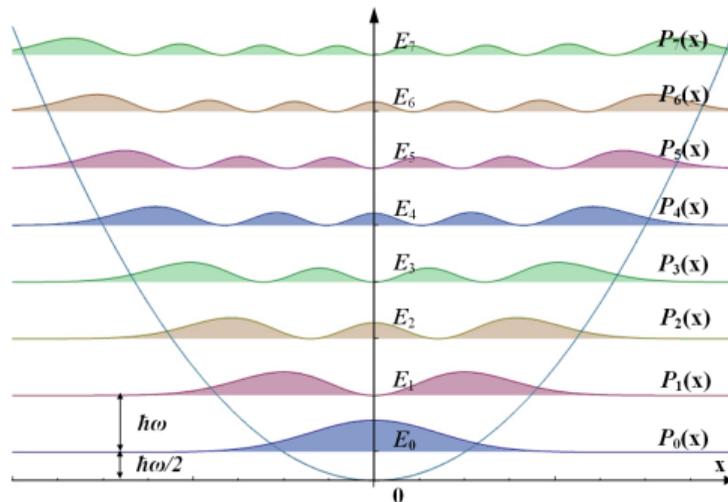
- Opérateur de position :  $\hat{x}/\hat{x} |\psi(t)\rangle = \psi(\vec{r}, t)$
- Opérateur d'impulsion :  $\hat{p}/\hat{p} |\psi(t)\rangle = \psi(\vec{p}, t)$ ,  
en représentation spatiale  $\hat{p} = -i\hbar\nabla \rightarrow$  transformée de Fourier
- Opérateur d'énergie: Hamiltonien  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$
- Les quantités physiques observables sont associées à des opérateurs auto-adjoints:  $\hat{T}^\dagger = \hat{T}$  donc sont diagonalisables
  - $\exists \{t_0, t_1, \dots\}, \exists \{\psi_0, \psi_1, \dots\} / \hat{T} |\psi_0\rangle = t_0 |\psi_0\rangle, \hat{T} |\psi_1\rangle = t_1 |\psi_1\rangle, \dots$
  - Les  $\psi_i$  sont une base orthonormée,  $\forall i, j, \langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{i,j}$
  - L'ensemble des valeurs propres (spectre des valeurs) peut être continu (e.g.  $\hat{x}$ ), discret (pour les systèmes contraints), ou un mélange des deux
- Évolution = équation de Schrödinger :  $\frac{d|\psi\rangle}{dt} = \left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\right) |\psi\rangle$
- Exemple : oscillateur harmonique 1D
 
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$
  - $e_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right), n \in \mathbb{N}$

- Les solutions non stationnaires sont transitoires
- Les énergies apparaissent sur un spectre discret :  $e_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$ ,  $n \in \mathbb{N}$ 
  - l'énergie minimum est non nulle:  $e_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$

- Les solutions non stationnaires sont transitoires
- Les énergies apparaissent sur un spectre discret :  $e_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$ ,  $n \in \mathbb{N}$ 
  - l'énergie minimum est non nulle:  $e_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$

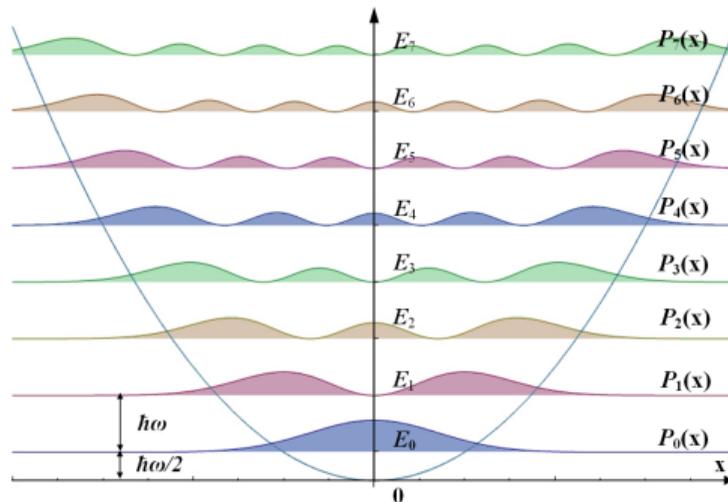


- Les solutions non stationnaires sont transitoires
- Les énergies apparaissent sur un spectre discret :  $e_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$ ,  $n \in \mathbb{N}$ 
  - l'énergie minimum est non nulle:  $e_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$



- Systèmes quantiques  $\neq$  systèmes classiques

- Les solutions non stationnaires sont transitoires
- Les énergies apparaissent sur un spectre discret :  $e_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$ ,  $n \in \mathbb{N}$ 
  - l'énergie minimum est non nulle:  $e_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$



- Systèmes quantiques  $\neq$  systèmes classiques
- Système confiné  $\rightarrow$  il existe des états discrets et une discrétisation des énergies associées

## Évolutions d'un système quantique, propagateur:

- Cas de l'équation de Schrödinger:  $i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H} |\psi(t)\rangle$
- Si  $\hat{H}$  est indépendant du temps :  $|\psi(t)\rangle = e^{i\hat{H}\frac{t-t_0}{\hbar}} |\psi(t_0)\rangle = \hat{U}(t-t_0) |\psi(t_0)\rangle$
- $\hat{U}$  est l'opérateur de translation temporelle et  $K(\vec{r}, t | \vec{r}_0, t_0) = \langle \hat{r} | \hat{U}(t-t_0) | \hat{r}_0 \rangle$  est le propagateur de Schrödinger
- La fonction d'onde en  $\vec{r}, t$  s'exprime directement comme produit de convolution de la fonction d'onde en  $\vec{r}_0, t_0$

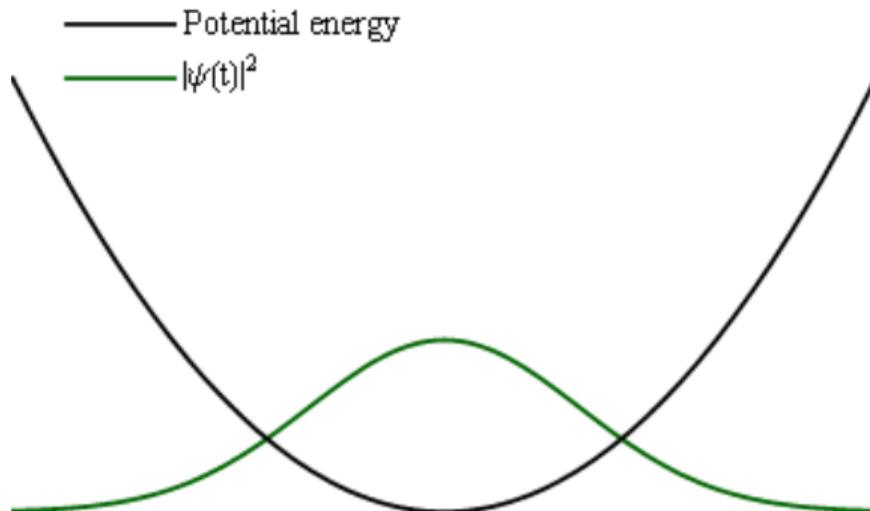
Évolutions d'un système quantique, propagateur:

- Cas de l'équation de Schrödinger:  $i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H} |\psi(t)\rangle$
- Si  $\hat{H}$  est indépendant du temps :  $|\psi(t)\rangle = e^{i\hat{H}\frac{t-t_0}{\hbar}} |\psi(t_0)\rangle = \hat{U}(t-t_0) |\psi(t_0)\rangle$
- $\hat{U}$  est l'opérateur de translation temporelle et  $K(\vec{r}, t | \vec{r}_0, t_0) = \langle \hat{r} | \hat{U}(t-t_0) | \hat{r}_0 \rangle$  est le propagateur de Schrödinger
- La fonction d'onde en  $\vec{r}, t$  s'exprime directement comme produit de convolution de la fonction d'onde en  $\vec{r}_0, t_0$
- Les équations de la mécanique quantique sont déterministes

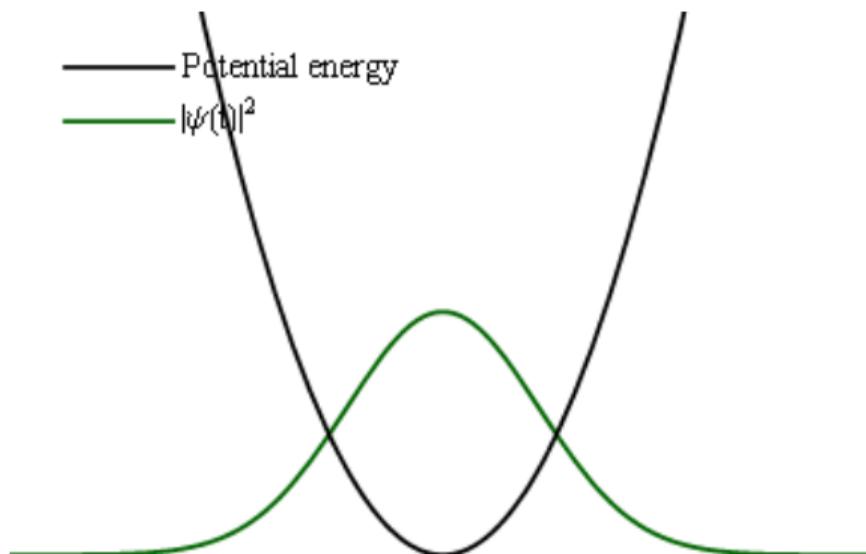
Théorème adiabatique [Born, Fock, 1928]

- Pour un système dont le hamiltonien  $\hat{H}(t)$  dépend du temps
- Si la variation de  $\hat{H}(t)$  est suffisamment lente
- Principe d'incertitude:  $\Delta E \Delta t \geq \hbar$   
en choisissant une constante de relaxation  $\tau/\tau \gg \frac{\hbar}{\Delta H}$  le système quantique peut être vu comme une succession progressive d'états stationnaires de  $\hat{H}$

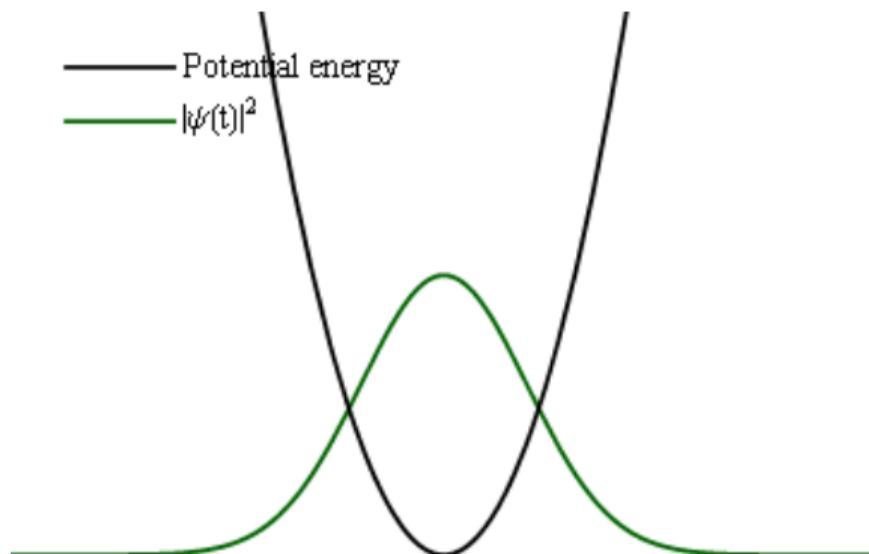
En faisant varier doucement  $\omega$  lentement, on reste sur l'état fondamental



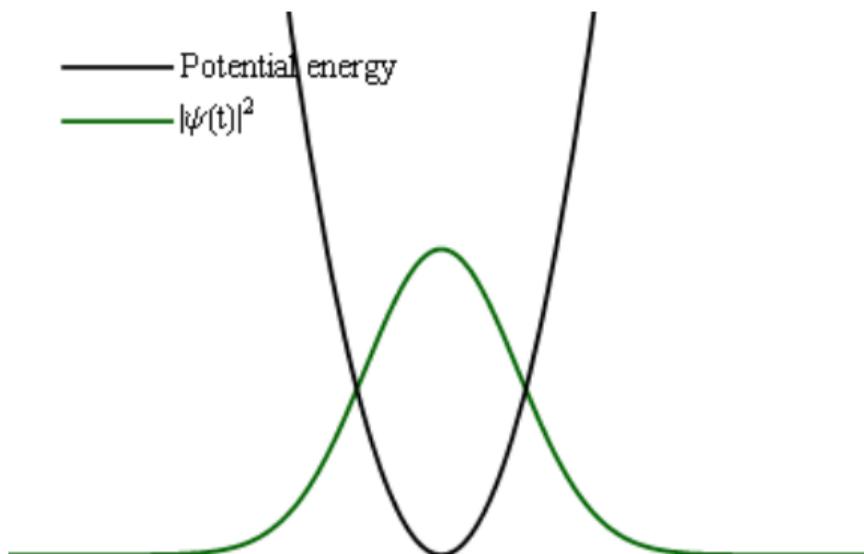
En faisant varier doucement  $\omega$  lentement, on reste sur l'état fondamental



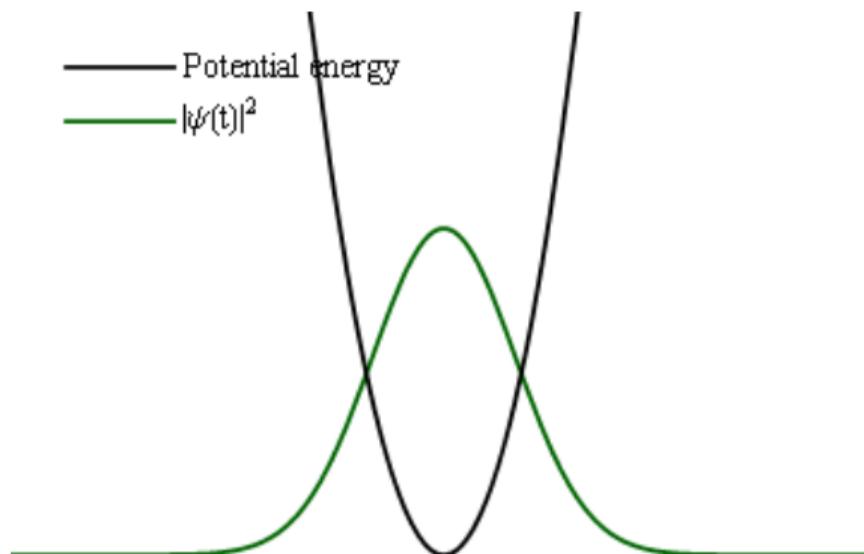
En faisant varier doucement  $\omega$  lentement, on reste sur l'état fondamental



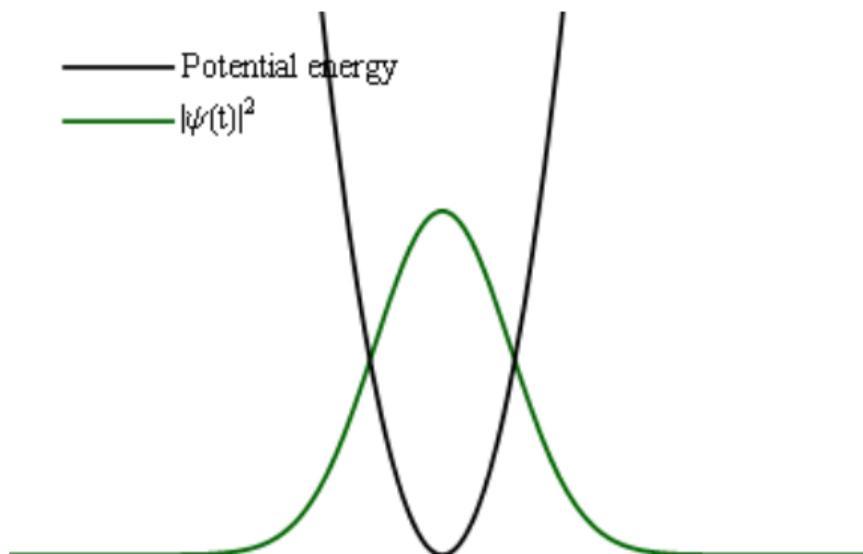
En faisant varier doucement  $\omega$  lentement, on reste sur l'état fondamental



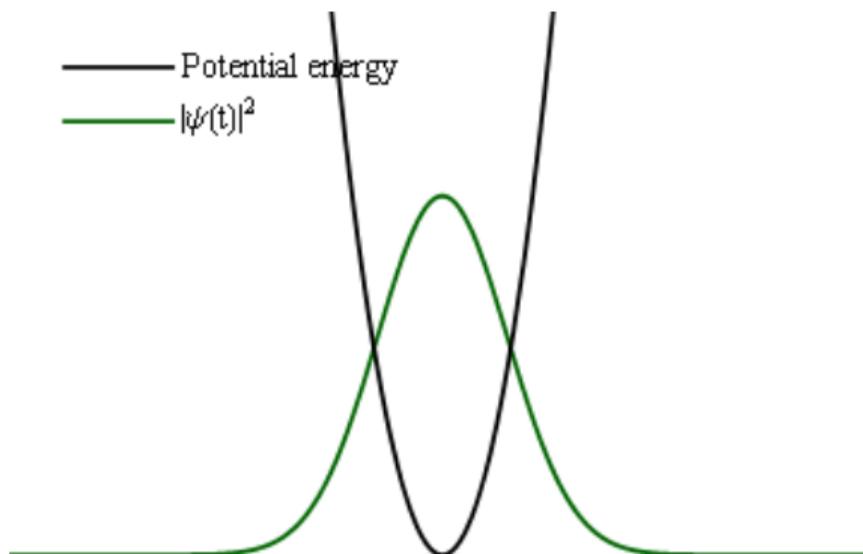
En faisant varier doucement  $\omega$  lentement, on reste sur l'état fondamental



En faisant varier doucement  $\omega$  lentement, on reste sur l'état fondamental



En faisant varier doucement  $\omega$  lentement, on reste sur l'état fondamental



La mécanique quantique est en générale considérée non déterministe à cause de la mesure

- Lors de la mesure, le système quantique n'est plus isolé
- Le système n'est plus régit par l'équation de Schrödinger

La mécanique quantique est en générale considérée non déterministe à cause de la mesure

- Lors de la mesure, le système quantique n'est plus isolé
- Le système n'est plus régi par l'équation de Schrödinger
- Interprétation de Copenhague de la mesure :
  - Avec  $|\psi(t)\rangle = \sum_i c_i |m_i\rangle$  où les  $|m_i\rangle$  sont des valeurs propres de l'observable  $\hat{M}$
  - La mesure de  $M$  sur le système quantique donne  $m_i$  avec la probabilité  $|c_i|^2$

La mécanique quantique est en générale considérée non déterministe à cause de la mesure

- Lors de la mesure, le système quantique n'est plus isolé
- Le système n'est plus régi par l'équation de Schrödinger
- Interprétation de Copenhague de la mesure :
  - Avec  $|\psi(t)\rangle = \sum_i c_i |m_i\rangle$  où les  $|m_i\rangle$  sont des valeurs propres de l'observable  $\hat{M}$
  - La mesure de  $M$  sur le système quantique donne  $m_i$  avec la probabilité  $|c_i|^2$
  - Après la mesure il y a "réduction" de la fonction d'onde  $|\psi(t_m)\rangle = |m_i\rangle$
  - La mesure détruit l'information codée dans la fonction d'onde

La mécanique quantique est en générale considérée non déterministe à cause de la mesure

- Lors de la mesure, le système quantique n'est plus isolé
- Le système n'est plus régi par l'équation de Schrödinger
- Interprétation de Copenhague de la mesure :
  - Avec  $|\psi(t)\rangle = \sum_i c_i |m_i\rangle$  où les  $|m_i\rangle$  sont des valeurs propres de l'observable  $\hat{M}$
  - La mesure de  $M$  sur le système quantique donne  $m_i$  avec la probabilité  $|c_i|^2$
  - Après la mesure il y a "réduction" de la fonction d'onde  $|\psi(t_m)\rangle = |m_i\rangle$
  - La mesure détruit l'information codée dans la fonction d'onde
- Une autre limitation importante est le temps de cohérence

La mécanique quantique est en générale considérée non déterministe à cause de la mesure

- Lors de la mesure, le système quantique n'est plus isolé
- Le système n'est plus régi par l'équation de Schrödinger
- Interprétation de Copenhague de la mesure :
  - Avec  $|\psi(t)\rangle = \sum_i c_i |m_i\rangle$  où les  $|m_i\rangle$  sont des valeurs propres de l'observable  $\hat{M}$
  - La mesure de  $M$  sur le système quantique donne  $m_i$  avec la probabilité  $|c_i|^2$
  - Après la mesure il y a "réduction" de la fonction d'onde  $|\psi(t_m)\rangle = |m_i\rangle$
  - La mesure détruit l'information codée dans la fonction d'onde
- Une autre limitation importante est le temps de cohérence
  - Tout algorithme quantique admettra ces bornes pour sa réalisation pratique : temps de relaxation adiabatique et temps de cohérence

## Section 2

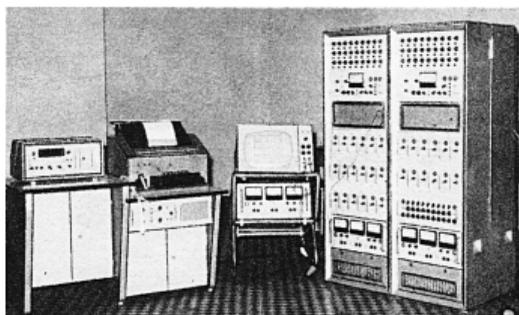
# Application au calcul et à l'optimisation

## Principe de l'utilisation en calcul et optimisation

- Rechercher un  $\hat{H}$  tel que :
  - la configuration d'énergie minimale est transformable en un problème dont on cherche la solution

## Principe de l'utilisation en calcul et optimisation

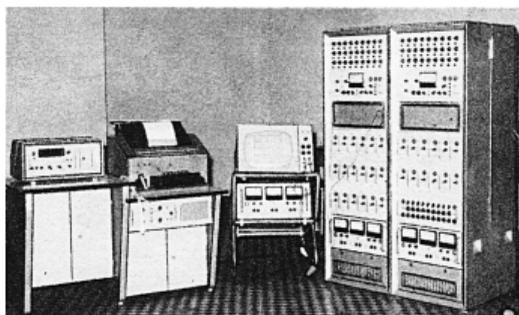
- Rechercher un  $\hat{H}$  tel que :
  - la configuration d'énergie minimale est transformable en un problème dont on cherche la solution
  - une analogie avec les ordinateurs analogiques des années 60-70 pour la résolution des équations différentielles



- *utilisés pour le contrôle en automatique (e.g. CEA-CISI)*

## Principe de l'utilisation en calcul et optimisation

- Rechercher un  $\hat{H}$  tel que :
  - la configuration d'énergie minimale est transformable en un problème dont on cherche la solution
  - une analogie avec les ordinateurs analogiques des années 60-70 pour la résolution des équations différentielles



- *utilisés pour le contrôle en automatique (e.g. CEA-CISI)*
- Le but est que la configuration d'énergie minimale finale fournisse une solution à un problème qui nous intéresse

Cas du problème de verre de spin (problème d'Ising)

- C'est le problème de base des machines D-Wave



## Cas du problème de verre de spin (problème d'Ising)

- C'est le problème de base des machines D-Wave



- Sur un verre de spin, les spins sont des valeurs binaires  $|-1\rangle_Z$  et  $|1\rangle_Z$
- Le hamiltonien :  $\mathcal{H}(\mathbf{h}, \mathbf{J}, \boldsymbol{\sigma}) = \sum_i h_i \sigma_i + \sum_{i < j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j$  avec  $\sigma_k$  les spins et  $J_{i,j}$  les coefficients de couplage

## Cas du problème de verre de spin (problème d'Ising)

- C'est le problème de base des machines D-Wave



- Sur un verre de spin, les spins sont des valeurs binaires  $|-1\rangle_Z$  et  $|1\rangle_Z$
- Le hamiltonien :  $\mathcal{H}(\mathbf{h}, \mathbf{J}, \boldsymbol{\sigma}) = \sum_i h_i \sigma_i + \sum_{i < j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j$  avec  $\sigma_k$  les spins et  $J_{i,j}$  les coefficients de couplage
- Le problème d'Ising pour  $J_{i,j}$  quelconque est équivalent par changement de variable au problème d'optimisation classique QUBO (Quadratic Unconstrained Binary Optimization)  $\rightarrow \min_{|t\rangle} \langle t | \hat{H} | t \rangle$

## L'avantage des ordinateurs D-Wave

- Disponible commercialement aujourd'hui
- Grand nombre de qubits
- Potentiel d'utilisation pour les problèmes d'optimisation

## L'avantage des ordinateurs D-Wave

- Disponible commercialement aujourd'hui
- Grand nombre de qubits
- Potentiel d'utilisation pour les problèmes d'optimisation

## Limitations des ordinateurs D-Wave

- Très faible taux d'interconnexion (les  $J_{i,j}$ )
- Réduit dramatiquement les capacité de résolution et la portée de la capacité de résolution de problèmes concrets

## L'avantage des ordinateurs D-Wave

- Disponible commercialement aujourd'hui
- Grand nombre de qubits
- Potentiel d'utilisation pour les problèmes d'optimisation

## Limitations des ordinateurs D-Wave

- Très faible taux d'interconnexion (les  $J_{i,j}$ )
- Réduit dramatiquement les capacité de résolution et la portée de la capacité de résolution de problèmes concrets

## Ces limitations importantes

Sont bien comprises par la société D-Wave et de mieux en mieux par la communauté

- La nouvelle version du processeur double l'interconnexion

## L'avantage des ordinateurs D-Wave

- Disponible commercialement aujourd'hui
- Grand nombre de qubits
- Potentiel d'utilisation pour les problèmes d'optimisation

## Limitations des ordinateurs D-Wave

- Très faible taux d'interconnexion (les  $J_{i,j}$ )
- Réduit dramatiquement les capacité de résolution et la portée de la capacité de résolution de problèmes concrets

## Ces limitations importantes

Sont bien comprises par la société D-Wave et de mieux en mieux par la communauté

- La nouvelle version du processeur double l'interconnexion
- Doubler quelque chose de petit, ne fait pas forcément grand chose

## L'avantage des ordinateurs D-Wave

- Disponible commercialement aujourd'hui
- Grand nombre de qubits
- Potentiel d'utilisation pour les problèmes d'optimisation

## Limitations des ordinateurs D-Wave

- Très faible taux d'interconnexion (les  $J_{i,j}$ )
- Réduit dramatiquement les capacité de résolution et la portée de la capacité de résolution de problèmes concrets

## Ces limitations importantes

Sont bien comprises par la société D-Wave et de mieux en mieux par la communauté

- La nouvelle version du processeur double l'interconnexion
- Doubler quelque chose de petit, ne fait pas forcément grand chose
- Amélioration qualitative et quantitative à évaluer

## Section 3

### D-Wave utilisation : dépasser les contraintes

L'évaluation des machines quantiques pose plusieurs questions:

- Avec quoi comparer ?

L'évaluation des machines quantiques pose plusieurs questions:

- Avec quoi comparer ?
  - Recuit adiabatique > Recuit simulé ?

L'évaluation des machines quantiques pose plusieurs questions:

- Avec quoi comparer ?
  - Recuit adiabatique > Recuit simulé ?
- Comment programmer ?
  - Passage d'un problème quelconque à un problème QUBO (Ising)

L'évaluation des machines quantiques pose plusieurs questions:

- Avec quoi comparer ?
  - Recuit adiabatique > Recuit simulé ?
- Comment programmer ?
  - Passage d'un problème quelconque à un problème QUBO (Ising)
  - Savoir faire à acquérir
- Comment obtenir des résultats les plus précis possible ?
  - qubit flip pour compenser les biais systématiques du HW

L'évaluation des machines quantiques pose plusieurs questions:

- Avec quoi comparer ?
  - Recuit adiabatique > Recuit simulé ?
- Comment programmer ?
  - Passage d'un problème quelconque à un problème QUBO (Ising)
  - Savoir faire à acquérir
- Comment obtenir des résultats les plus précis possible ?
  - qubit flip pour compenser les biais systématiques du HW
  - également : post-processing = des choses à tester et à inventer pour compenser les imperfections de la machine et avoir des résultats exploitables

L'évaluation des machines quantiques pose plusieurs questions:

- Avec quoi comparer ?
  - Recuit adiabatique > Recuit simulé ?
- Comment programmer ?
  - Passage d'un problème quelconque à un problème QUBO (Ising)
  - Savoir faire à acquérir
- Comment obtenir des résultats les plus précis possible ?
  - qubit flip pour compenser les biais systématiques du HW
  - également : post-processing = des choses à tester et à inventer pour compenser les imperfections de la machine et avoir des résultats exploitables

Beaucoup de savoir faire à apprendre avant de “programmer” un calculateur quantique et en exploiter les résultats

- Problème d'Ising généralisé:  $\mathcal{H}(\mathbf{h}, \mathbf{J}, \boldsymbol{\sigma}) = \sum_i h_i \sigma_i + \sum_{i < j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j$  avec  $\sigma_k$  les spins et  $J_{i,j}$
- Problème QUBO e.g.  $f = \mathbf{x}^T \mathbf{Q} \mathbf{x} = \sum_{i \leq j} q_{i,j} x_i x_j$  avec  $x_i \in \{0, 1\}, \forall i$
- Changement de variable:  $\sigma_i = 2x_i - 1$ , on obtient:

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) = \sum_{i \leq j} q_{ij} x_i x_j + C_H \quad \text{avec} \quad q_{ij} = \begin{cases} 4J_{ij} & i \neq j \\ -\sum_k 2J_{ki} - \sum_k 2J_{ik} + 2h_i & i = j \end{cases} \quad (1)$$

$$C_H = \sum_{ij} J_{ij} + \sum_i h_i$$

- Changement de variable:  $x_i = \frac{\sigma_i + 1}{2}$

$$f(\sigma) = \mathcal{H} = \sum_{i < j} J_{ij} + \sum_i h_i + C_x \quad \text{avec} \quad J_{ij} = \frac{q_{ij}}{4} \quad (2)$$

$$h_i = \frac{1}{4} \left( q_{ii} + \sum_k q_{ik} + \sum_k q_{ki} \right), \quad C_x = \frac{1}{4} \sum_{ij} q_{ij}$$

- La SRT est simplement l'idée d'une transformation :
  - Pour QUBO:  $y_k = 1 - x_k$
  - Pour Ising:  $\sigma'_k = -\sigma_k$

- La SRT est simplement l'idée d'une transformation :
  - Pour QUBO:  $y_k = 1 - x_k$
  - Pour Ising:  $\sigma'_k = -\sigma_k$
- Pourquoi ?
  - Les ordinateurs quantiques actuels ne sont pas parfaits

- La SRT est simplement l'idée d'une transformation :
  - Pour QUBO:  $y_k = 1 - x_k$
  - Pour Ising:  $\sigma'_k = -\sigma_k$
- Pourquoi ?
  - Les ordinateurs quantiques actuels ne sont pas parfaits
  - Une partie des imperfections = biais systématique
    - sur les valeurs des qubits
    - sur les couplages

- La SRT est simplement l'idée d'une transformation :
  - Pour QUBO:  $y_k = 1 - x_k$
  - Pour Ising:  $\sigma'_k = -\sigma_k$
- Pourquoi ?
  - Les ordinateurs quantiques actuels ne sont pas parfaits
  - Une partie des imperfections = biais systématique
    - sur les valeurs des qubits
    - sur les couplages
  - Les biais changent au cours du temps
  - Utiliser la SRT est une façon d'en limiter l'impact

- La SRT est simplement l'idée d'une transformation :
  - Pour QUBO:  $y_k = 1 - x_k$
  - Pour Ising:  $\sigma'_k = -\sigma_k$
- Pourquoi ?
  - Les ordinateurs quantiques actuels ne sont pas parfaits
  - Une partie des imperfections = biais systématique
    - sur les valeurs des qubits
    - sur les couplages
  - Les biais changent au cours du temps
  - Utiliser la SRT est une façon d'en limiter l'impact
- Comment ?
  - **Attention:** il ne faut pas changer le résultat optimal  $J'_{ik} = -J_{ik}$  et  $J'_{ki} = -J_{ki}$  et  $h'_k = -h_k$   
 $q'_{ik} = -q_{ik}$ ,  $q'_{ki} = -q_{ki}$ ,  $i \neq k$  et  $q'_{kk} = -q_{kk}$  et  $q'_{ij} = q_{ij} + q_{ik} + q_{ki}$ ,  $i \neq k$  et  $C_{SRT} = q_{kk}$
  - Comme les condiments en cuisine: ni trop, ni trop peu ( $\simeq 10\%$ )

- La SRT est simplement l'idée d'une transformation :
  - Pour QUBO:  $y_k = 1 - x_k$
  - Pour Ising:  $\sigma'_k = -\sigma_k$
- Pourquoi ?
  - Les ordinateurs quantiques actuels ne sont pas parfaits
  - Une partie des imperfections = biais systématique
    - sur les valeurs des qubits
    - sur les couplages
  - Les biais changent au cours du temps
  - Utiliser la SRT est une façon d'en limiter l'impact
- Comment ?
  - **Attention:** il ne faut pas changer le résultat optimal  $J'_{ik} = -J_{ik}$  et  $J'_{ki} = -J_{ki}$  et  $h'_k = -h_k$   
 $q'_{ik} = -q_{ik}$ ,  $q'_{ki} = -q_{ki}$ ,  $i \neq k$  et  $q'_{kk} = -q_{kk}$  et  $q'_{ii} = q_{ii} + q_{ik} + q_{ki}$ ,  $i \neq k$  et  $C_{SRT} = q_{kk}$
  - Comme les condiments en cuisine: ni trop, ni trop peu ( $\simeq 10\%$ )

**N.B.:** le problème de biais de qubits existe aussi dans certains autres types d'ordinateurs quantiques

- D-Wave 1 (2011):  $\leq 128$  qubits,  $\leq 312$  coupleurs
- D-Wave 2 (2013):  $\leq 512$  qubits,  $\leq 1472$  coupleurs (Chimera)  $\simeq 6$  coupleurs/qubit
- D-Wave 2X (2015):  $\leq 1152$  qubits,  $\leq 3360$  coupleurs (Chimera)
- D-Wave 200Q (2017):  $\leq 2048$  qubits,  $\leq 6016$  coupleurs (Chimera)
- D-Wave Advantage (2020):  $\leq 5640$  qubits,  $\leq 40484$  coupleurs (Pegasus)  $\simeq 15$  coupleurs/qubit



- Le graphe d'interconnexion est peu dense p/r aux nombre de qubits disponibles

- Le graphe d'interconnexion est peu dense p/r aux nombre de qubits disponibles
- Tous les qubits d'une machine réelle ne sont pas fonctionnels
  - on peut s'attendre à quelques pourcents des qubits non fonctionnels
  - le mapping des problèmes doit prendre les qubits non-fonctionnels en compte
  - cela varie d'une machine à l'autre

- Le graphe d'interconnexion est peu dense p/r aux nombre de qubits disponibles
- Tous les qubits d'une machine réelle ne sont pas fonctionnels
  - on peut s'attendre à quelques pourcents des qubits non fonctionnels
  - le mapping des problèmes doit prendre les qubits non-fonctionnels en compte
  - cela varie d'une machine à l'autre
- Les qubits peuvent avoir des biais qui dépendent de la machine et des couplages mis en œuvre (d'où les SRTs)

- Le graphe d'interconnexion est peu dense p/r aux nombre de qubits disponibles
- Tous les qubits d'une machine réelle ne sont pas fonctionnels
  - on peut s'attendre à quelques pourcents des qubits non fonctionnels
  - le mapping des problèmes doit prendre les qubits non-fonctionnels en compte
  - cela varie d'une machine à l'autre
- Les qubits peuvent avoir des biais qui dépendent de la machine et des couplages mis en œuvre (d'où les SRTs)
- Le recuit adiabatique est une heuristique qui tente d'approcher les conditions du théorème adiabatique, mais dont on ne peut pas connaître la précision

- L'évolution lente (adiabatique) d'un système quantique entre un hamiltonien initial  $\mathcal{H}_0$  et un hamiltonien final  $\mathcal{H}_1$  s'il part de l'état fondamental, reste dans l'état fondamental (Th adiabatique)

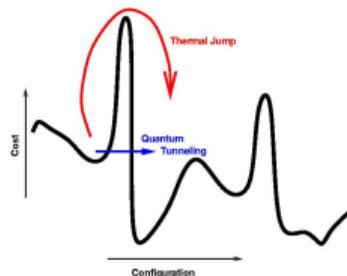
- L'évolution lente (adiabatique) d'un système quantique entre un hamiltonien initial  $\mathcal{H}_0$  et un hamiltonien final  $\mathcal{H}_1$  s'il part de l'état fondamental, reste dans l'état fondamental (Th adiabatique)
- En choisissant un  $\mathcal{H}_0$  facile à résoudre, et un  $\mathcal{H}_1$  qui nous intéresse, le théorème adiabatique permet théoriquement de résoudre n'importe quel problème d'Ising généralisé

- L'évolution lente (adiabatique) d'un système quantique entre un hamiltonien initial  $\mathcal{H}_0$  et un hamiltonien final  $\mathcal{H}_1$  s'il part de l'état fondamental, reste dans l'état fondamental (Th adiabatique)
- En choisissant un  $\mathcal{H}_0$  facile à résoudre, et un  $\mathcal{H}_1$  qui nous intéresse, le théorème adiabatique permet théoriquement de résoudre n'importe quel problème d'Ising généralisé
  - Soit  $\mathcal{H}_0 = \sum_{ij} \sigma_i^x \sigma_j^x$  (hamiltonien ferromagnétique) dont les solutions sont  $\sigma^x = \pm \mathbf{1}^x$
  - et  $\mathcal{H}_1 = \sum_i h_i \sigma_i^z + \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z$
  - $\mathcal{H}(t) = \frac{t}{\tau} \mathcal{H}_0 + (1 - \frac{t}{\tau}) \mathcal{H}_1 / \mathcal{H}(0) = \mathcal{H}_0$  et  $\mathcal{H}(\tau) = \mathcal{H}_1$

- L'évolution lente (adiabatique) d'un système quantique entre un hamiltonien initial  $\mathcal{H}_0$  et un hamiltonien final  $\mathcal{H}_1$  s'il part de l'état fondamental, reste dans l'état fondamental (Th adiabatique)
- En choisissant un  $\mathcal{H}_0$  facile à résoudre, et un  $\mathcal{H}_1$  qui nous intéresse, le théorème adiabatique permet théoriquement de résoudre n'importe quel problème d'Ising généralisé
  - Soit  $\mathcal{H}_0 = \sum_{ij} \sigma_i^x \sigma_j^x$  (hamiltonien ferromagnétique) dont les solutions sont  $\sigma^x = \pm \mathbf{1}^x$
  - et  $\mathcal{H}_1 = \sum_i h_i \sigma_i^z + \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z$
  - $\mathcal{H}(t) = \frac{t}{\tau} \mathcal{H}_0 + (1 - \frac{t}{\tau}) \mathcal{H}_1 / \mathcal{H}(0) = \mathcal{H}_0$  et  $\mathcal{H}(\tau) = \mathcal{H}_1$
  - Avec  $\sigma_i^x(0) = |1\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (|-1\rangle_z + |1\rangle_z) \implies \sigma_i^z(\tau)$  solution de  $\min_{\sigma^z} \mathcal{H}_1(\sigma^z)$

- L'évolution lente (adiabatique) d'un système quantique entre un hamiltonien initial  $\mathcal{H}_0$  et un hamiltonien final  $\mathcal{H}_1$  s'il part de l'état fondamental, reste dans l'état fondamental (Th adiabatique)
- En choisissant un  $\mathcal{H}_0$  facile à résoudre, et un  $\mathcal{H}_1$  qui nous intéresse, le théorème adiabatique permet théoriquement de résoudre n'importe quel problème d'Ising généralisé
  - Soit  $\mathcal{H}_0 = \sum_{ij} \sigma_i^x \sigma_j^x$  (hamiltonien ferromagnétique) dont les solutions sont  $\sigma^x = \pm \mathbf{1}^x$
  - et  $\mathcal{H}_1 = \sum_i h_i \sigma_i^z + \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z$
  - $\mathcal{H}(t) = \frac{t}{\tau} \mathcal{H}_0 + (1 - \frac{t}{\tau}) \mathcal{H}_1 / \mathcal{H}(0) = \mathcal{H}_0$  et  $\mathcal{H}(\tau) = \mathcal{H}_1$
  - Avec  $\sigma_i^x(0) = |1\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (|-1\rangle_z + |1\rangle_z) \implies \sigma_i^z(\tau)$  solution de  $\min_{\sigma^z} \mathcal{H}_1(\sigma^z)$
  - **Mais** vrai pour  $\tau \propto \frac{1}{\Delta E^*2}$

- L'évolution lente (adiabatique) d'un système quantique entre un hamiltonien initial  $\mathcal{H}_0$  et un hamiltonien final  $\mathcal{H}_1$  s'il part de l'état fondamental, reste dans l'état fondamental (Th adiabatique)
- En choisissant un  $\mathcal{H}_0$  facile à résoudre, et un  $\mathcal{H}_1$  qui nous intéresse, le théorème adiabatique permet théoriquement de résoudre n'importe quel problème d'Ising généralisé
  - Soit  $\mathcal{H}_0 = \sum_{ij} \sigma_i^x \sigma_j^x$  (hamiltonien ferromagnétique) dont les solutions sont  $\sigma^x = \pm \mathbf{1}^x$
  - et  $\mathcal{H}_1 = \sum_i h_i \sigma_i^z + \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z$
  - $\mathcal{H}(t) = \frac{t}{\tau} \mathcal{H}_0 + (1 - \frac{t}{\tau}) \mathcal{H}_1 / \mathcal{H}(0) = \mathcal{H}_0$  et  $\mathcal{H}(\tau) = \mathcal{H}_1$
  - Avec  $\sigma_i^x(0) = |1\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (|-1\rangle_z + |1\rangle_z) \implies \sigma_i^z(\tau)$  solution de  $\min_{\sigma^z} \mathcal{H}_1(\sigma^z)$
  - **Mais** vrai pour  $\tau \propto \frac{1}{\Delta E^{*2}}$
- le recuit quantique/adiabatique reste une méta-heuristique du même type que le recuit simulés
  - Potentielle accélération quantique = effet tunnel
  - N.B.: sur D-Wave l'effet tunnel n'a été vérifié que sur des sous-graphes très petits



- Transformer le problème initial en QUBO/hamiltonien d'Ising
- Normaliser les couplages d'Ising/QUBO pour que  $h_i \in [-2, 2]$  et  $J_{ij} \in [-1, 1]$
- Mapper le problème sur le graphe d'interconnexion
  - Peu de chance que le problème corresponde à l'interconnexion
  - Méthode 1: utiliser les outils de base D-Wave qui partitionnent le hamiltonien
    - inconvénient: peu de visibilité sur les opérations sous-jacentes et donc sur le rapport entre les problèmes résolus et le problème que l'on cherche à résoudre
  - Méthode 2: utiliser des outils de duplication de variables sur plusieurs qubits
    - inconvénient: utilisation potentielle de nombreux qubits pour chaque variables et potentiellement venir rapidement à bout du nombre de qubits disponibles sur la machine
- Compenser les biais de spin de la machine par l'utilisation de plusieurs groupe de SRTs

- Faire attention aux paramètres de fonctionnement de la machine:
  - Le temps de recuit (annealing time)
  - Le temps de pause
  - Beaucoup de paramètres accessibles mais difficile de bien les maîtriser sans bien connaître la machine
- Faire des études statistiques sur des batchs de résultats

/!\ Les vrais ordinateurs quantiques fonctionnent bien loin d'un régime idéal que l'on pourrait attendre

- Faire attention aux paramètres de fonctionnement de la machine:
  - Le temps de recuit (annealing time)
  - Le temps de pause
  - Beaucoup de paramètres accessibles mais difficile de bien les maîtriser sans bien connaître la machine
- Faire des études statistiques sur des batchs de résultats

/!\ Les vrais ordinateurs quantiques fonctionnent bien loin d'un régime idéal que l'on pourrait attendre

Illustration sur un problème particulier: le problème de cardinalité maximale (maximum matching)

## Section 4

# Le problème de cardinalité maximale et le D-Wave 2X

Chercher à caractériser un ordinateur quantique est un problème pas si simple:

- Quel problème utiliser
- Avec quel algorithme “classique” le comparer

Chercher à caractériser un ordinateur quantique est un problème pas si simple:

- Quel problème utiliser
- Avec quel algorithme “classique” le comparer

Les deux problèmes sont liés

- L'utilisation idéale des QC sera sur des problèmes NP-difficiles
- Problème de comparaison alors

Chercher à caractériser un ordinateur quantique est un problème pas si simple:

- Quel problème utiliser
- Avec quel algorithme “classique” le comparer

Les deux problèmes sont liés

- L'utilisation idéale des QC sera sur des problèmes NP-difficiles
- Problème de comparaison alors
- Idée: comparer le recuit quantique et le recuit simulé

Chercher à caractériser un ordinateur quantique est un problème pas si simple:

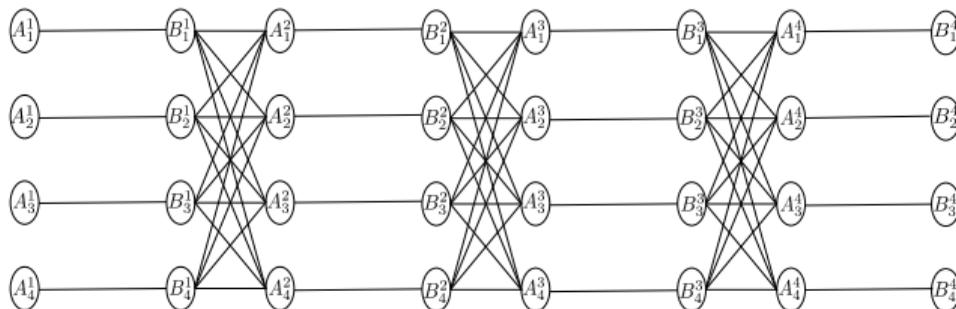
- Quel problème utiliser
- Avec quel algorithme “classique” le comparer

Les deux problèmes sont liés

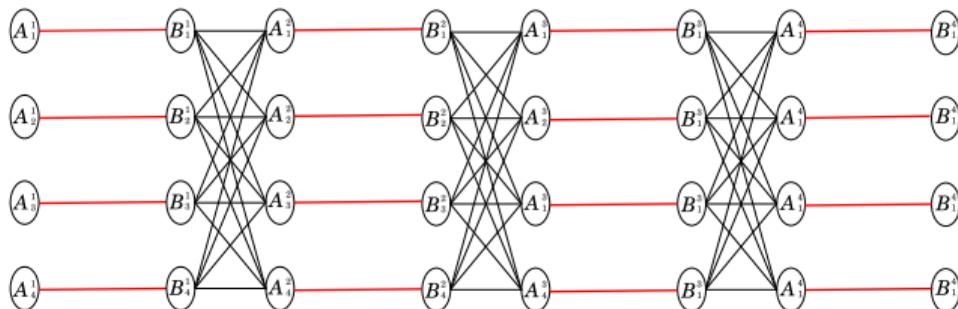
- L'utilisation idéale des QC sera sur des problèmes NP-difficiles
- Problème de comparaison alors
- Idée: comparer le recuit quantique et le recuit simulé

Résultat des années 80 [Sasaki & Hajek]

- Certains problèmes polynomiaux sont exponentiellement durs pour le recuit simulé, tout en étant polynomiaux
- C'est le cas du problème de cardinalité maximale
- Construction de la série de problème  $G_n$

Exemple:  $G_3$ 

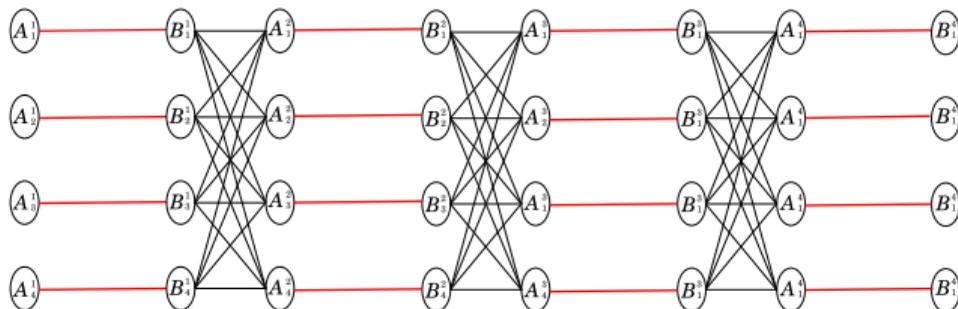
Exemple:  $G_3$



Piège pour le recuit simulé:

- Risque de se perdre dans les parties denses du graphe

Exemple:  $G_3$



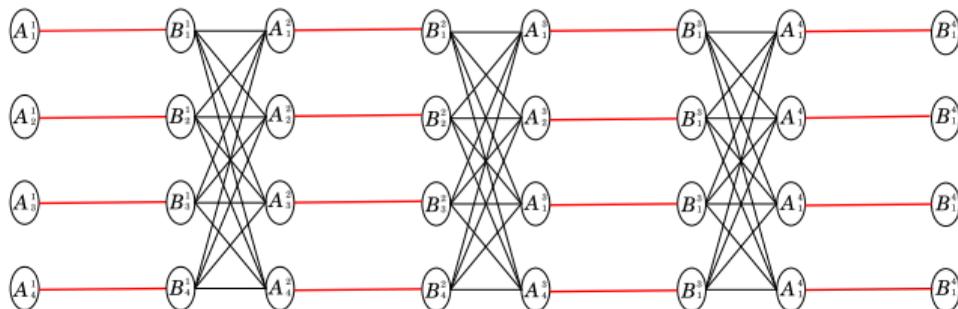
Piège pour le recuit simulé:

- Risque de se perdre dans les parties denses du graphe

Adaptation à un problème QUBO (Ising)

- Problème de cardinalité maximale = problème à contraintes  $\neq$  QUBO

Exemple:  $G_3$



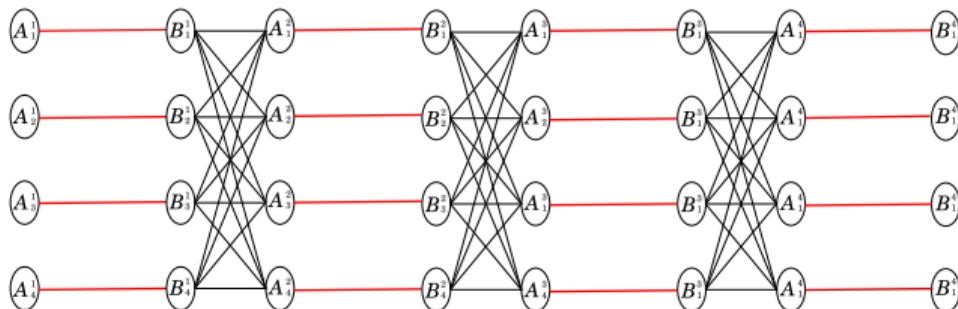
Piège pour le recuit simulé:

- Risque de se perdre dans les parties denses du graphe

Adaptation à un problème QUBO (Ising)

- Problème de cardinalité maximale = problème à contraintes  $\neq$  QUBO
- Faire rentrer les contraintes dans la fonction économique

Exemple:  $G_3$



Piège pour le recuit simulé:

- Risque de se perdre dans les parties denses du graphe

Adaptation à un problème QUBO (Ising)

- Problème de cardinalité maximale = problème à contraintes  $\neq$  QUBO
- Faire rentrer les contraintes dans la fonction économique
- On passe de contraintes fortes à des contraintes molles

Soit le graphe  $G_n = (N, E)$  notre graphe de la série  $G$ . Si on associe une variable  $x_e \in \{0, 1\}$  pour chaque arc, alors le problème peut s'exprimer sous la forme:

$$\sum_{e \in E} x_e \text{ maximum avec la contrainte } \forall v \in N, \sum_{e \in \Gamma(v)} x_e \leq 1$$

Soit le graphe  $G_n = (N, E)$  notre graphe de la série  $G$ . Si on associe une variable  $x_e \in \{0, 1\}$  pour chaque arc, alors le problème peut s'exprimer sous la forme:

$$\sum_{e \in E} x_e \text{ maximum avec la contrainte } \forall v \in N, \sum_{e \in \Gamma(v)} x_e \leq 1$$

On peut maximiser par exemple:

$$\sum_{e \in E} x_e - \lambda \sum_{v \in N} \left( \sum_{e \in \Gamma(v)} 1 - x_e \right)^2 =$$

$$\sum_{e \in E} x_e - \sum_{v \in N} \sum_{e \in \Gamma(v)} \sum_{e' \in \Gamma(v)} \lambda x_e x_{e'} + \sum_{v \in N} \sum_{e \in \Gamma(v)} 2\lambda x_e - \lambda |N|$$

Il faut ensuite développer sur les arcs pour trouver la matrice QUBO

QUBO (après changement de signe pour minimisation):

$$q_{ee} = -1 - 2\lambda \text{ et } q_{ee'} = \begin{cases} 2\lambda & \text{si } \exists v \in N/e \in \Gamma(v) \text{ et } e' \in \Gamma(v) \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Comme  $\sum_{e \in E} x_e \leq \text{card}\{E\}$  on peut prendre  $\lambda = \text{card}\{E\}$  comme majorant.

■ Exemple: G1

Figure TBD

$$Q_{G_1} = \begin{bmatrix} -17 & 0 & 16 & 16 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -17 & 0 & 0 & 16 & 16 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -17 & 16 & 16 & 0 & 16 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -17 & 0 & 16 & 0 & 16 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -17 & 16 & 16 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -17 & 0 & 16 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -17 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -17 \end{bmatrix}$$

1 arrête = 1 variable QUBO (un spin d'Ising)

- Même sur  $G_1$  les couplages binaires sont trop nombreux ( $> 6$ )

1 arrête = 1 variable QUBO (un spin d'Ising)

- Même sur  $G_1$  les couplages binaires sont trop nombreux ( $> 6$ )
- Insuffisance de la connectivité de la machine D-Wave

1 arrête = 1 variable QUBO (un spin d'Ising)

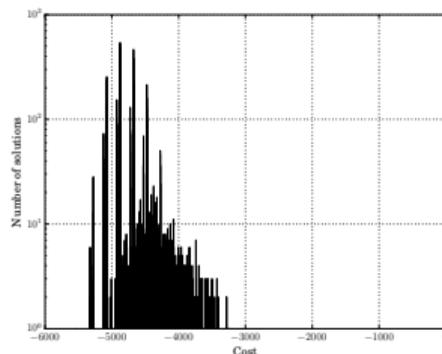
- Même sur  $G_1$  les couplages binaires sont trop nombreux ( $> 6$ )
- Insuffisance de la connectivité de la machine D-Wave
- Nécessité de compenser la connectivité en dupliquant les variables sur plusieurs qubits
- Forte baisse des capacités de résolution des machines D-Wave à cause de cela

	#var.	#qubits	average dup.	max. dup.
$G_1$	8	16	2.0	6
$G_2$	27	100	3.7	6
$G_3$	64	431	6.7	18
$G_4$	125	951	7.6	18

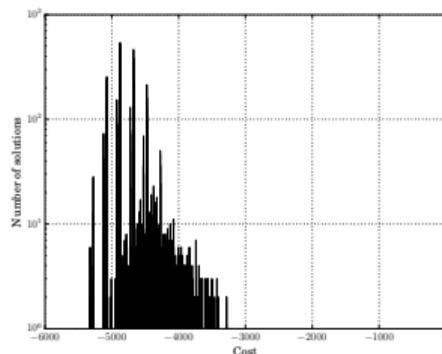
Mapping de  $G_4$  sur D-Wave 2X (USC)

La place des ordinateurs quantiques dits analogiques (D-Wave) | DCIN Division | 2-5 Novembre 2021, école QOR | 29

## Spectre du Hamiltonien/de la fonction économique sur 10000 exécutions

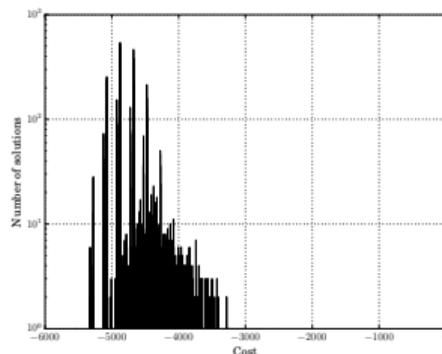


## Spectre du Hamiltonien/de la fonction économique sur 10000 exécutions



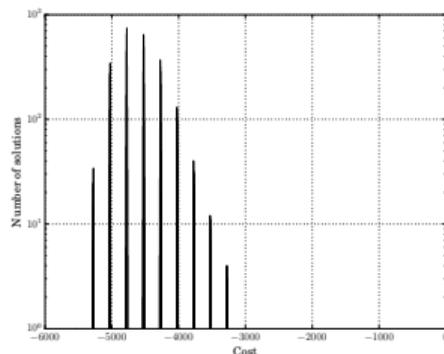
- La solution optimale n'est pas trouvée ni sur  $G_3$  ni sur  $G_4$
- Beaucoup de solutions ne sont pas correctes sur les duplications de variables

## Spectre du Hamiltonien/de la fonction économique sur 10000 exécutions



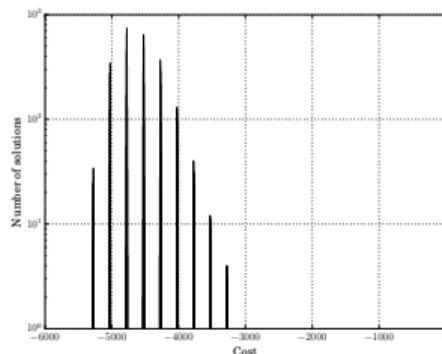
- La solution optimale n'est pas trouvée ni sur  $G_3$  ni sur  $G_4$
- Beaucoup de solutions ne sont pas correctes sur les duplications de variables
- Nécessité de post-traitements:
  - Bit-flip

## Spectre du Hamiltonien/de la fonction économique sur 10000 exécutions

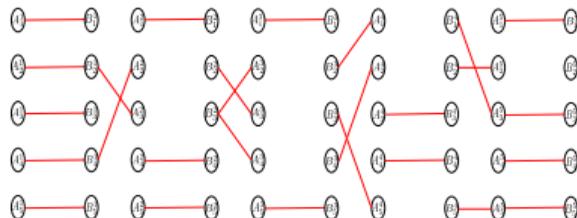


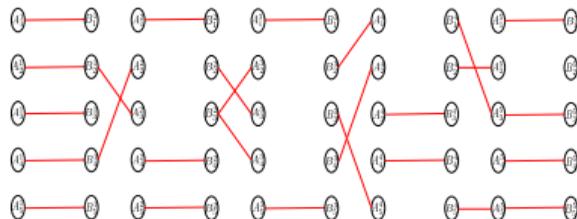
- La solution optimale n'est pas trouvée ni sur  $G_3$  ni sur  $G_4$
- Beaucoup de solutions ne sont pas correctes sur les duplications de variables
- Nécessité de post-traitements:
  - Bit-flip
  - Corrections d'inconsistences de variables dupliquées

## Spectre du Hamiltonien/de la fonction économique sur 10000 exécutions



- La solution optimale n'est pas trouvée ni sur  $G_3$  ni sur  $G_4$
- Beaucoup de solutions ne sont pas correctes sur les duplications de variables
- Nécessité de post-traitements:
  - Bit-flip
  - Corrections d'inconsistences de variables dupliquées
  - Il reste des inconsistences d'arrêtes sur les nœuds

Meilleure solution  $G_4$  sur D-Wave 2X

Meilleure solution  $G_4$  sur D-Wave 2X

## Cas du recuit simulé

		opt.	best	worst	mean	median	stdev
$G_1$	$n$	-68	-68	-68	-68	-68	0
	$n^{1.5}$	-68	-68	-68	-68	-68	0
	$n^2$	-68	-68	-68	-68	-68	0
$G_2$	$n$	-495	-495	-495	-495	-495	0
	$n^{1.5}$	-495	-495	-495	-495	-495	0
	$n^2$	-495	-495	-495	-495	-495	0
$G_3$	$n$	-2064	-2064	-1810	-2004.7	-2064	79.9
	$n^{1.5}$	-2064	-2064	-2064	-2064	-2064	0
	$n^2$	-2064	-2064	-2064	-2064	-2064	0
$G_4$	$n$	-6275	-6275	-5528	-5785.3	-5777	178.9
	$n^{1.5}$	-6275	-6275	-6026	-6241.8	-6275	86.1
	$n^2$	-6275	-6275	-6275	-6275	-6275	0

- Le D-Wave doit résoudre des problèmes beaucoup plus gros
- Lié à la duplication de variable pour compenser les limites topologiques

- Le D-Wave doit résoudre des problèmes beaucoup plus gros
- Lié à la duplication de variable pour compenser les limites topologiques
- What if: si nous comparions les deux recuits tels que la machine D-Wave doit les résoudre ?

		opt.	best	worst	mean	median
$G_4$ (Chim.)	$n$	-6275	-2213	3662	1453.9	1401.0
	$n^{1.5}$	-6275	-4526	-2654	-3585.6	-3699.8
	$n^2$	-6275	-5028	-4027	-4473.1	-4527.0
D-Wave		-6275	-5025	-3551	-4447.7	-4525

- Le D-Wave doit résoudre des problèmes beaucoup plus gros
- Lié à la duplication de variable pour compenser les limites topologiques
- What if: si nous comparions les deux recuits tels que la machine D-Wave doit les résoudre ?

		opt.	best	worst	mean	median
$G_4$ (Chim.)	$n$	-6275	-2213	3662	1453.9	1401.0
	$n^{1.5}$	-6275	-4526	-2654	-3585.6	-3699.8
	$n^2$	-6275	-5028	-4027	-4473.1	-4527.0
D-Wave		-6275	-5025	-3551	-4447.7	-4525

- A topologie identique pour le recuit simulé, les résultats sont comparables

- Le D-Wave doit résoudre des problèmes beaucoup plus gros
- Lié à la duplication de variable pour compenser les limites topologiques
- What if: si nous comparions les deux recuits tels que la machine D-Wave doit les résoudre ?

		opt.	best	worst	mean	median
$G_4$ (Chim.)	$n$	-6275	-2213	3662	1453.9	1401.0
	$n^{1.5}$	-6275	-4526	-2654	-3585.6	-3699.8
	$n^2$	-6275	-5028	-4027	-4473.1	-4527.0
D-Wave		-6275	-5025	-3551	-4447.7	-4525

- A topologie identique pour le recuit simulé, les résultats sont comparables
- Le D-Wave garde un avantage de vitesse ( $< 1s$  pour 1000 exécutions)

## Section 5

# Problèmes d'optimisation sur circuits quantiques

Deux cadres d'études en cours:

- Temps d'exécution pire cas (Worst-Case Execution Time, WCET)
- Attaque cryptographique à clair connu

Deux problèmes connus comme étant NP-difficiles.

Deux cadres d'études en cours:

- Temps d'exécution pire cas (Worst-Case Execution Time, WCET)
- Attaque cryptographique à clair connu

Deux problèmes connus comme étant NP-difficiles.

Approches :

- Optimisation quantiques d'algorithmes de programmation dynamique

Deux cadres d'études en cours:

- Temps d'exécution pire cas (Worst-Case Execution Time, WCET)
- Attaque cryptographique à clair connu

Deux problèmes connus comme étant NP-difficiles.

Approches :

- Optimisation quantiques d'algorithmes de programmation dynamique
  - Appliqué au cas du WCET
  - Capacité de passer d'un algorithme en  $O(N^3)$  à  $O(N^2 + N)$
  - Utilisation d'un sous-algorithme de Grover pour résoudre une superposition des états internes de la boucle la plus profonde de la programmation dynamique (pending publication)

- Quantum Approximate Optimisation Algorithm (QAOA, [Farhi & Goldstone 2014])
  - Un des algorithmes phares pour l'utilisation du QC
  - Approximation du recuit quantique par un circuit à porte quantique
  - Algorithme hybride qui utilise un optimiseur classique
  - Marche raisonnablement sur un simulateur

- Quantum Approximate Optimisation Algorithm (QAOA, [Farhi & Goldstone 2014])
  - Un des algorithmes phares pour l'utilisation du QC
  - Approximation du recuit quantique par un circuit à porte quantique
  - Algorithme hybride qui utilise un optimiseur classique
  - Marche raisonnablement sur un simulateur

Les algorithmes sont souvent hybrides (à part un Grover pur, mais souvent il est utilisé à l'intérieur d'un autre algorithme).

Le manque de fidélité et de volume quantique des ordinateurs NISQ est très limitant.

## Section 6

### Remarques de conclusion

Approches hamiltoniennes et lagrangiennes du calcul quantique potentiellement moins forts que les approches numériques, avec toutefois des voies tracées claires :

- Recherche Opérationnelle
- Configuration des molécules (e.g. protéines), autres simulations physiques
- Potentiellement: IA (apprentissage ML), autres problèmes a priori combinatoires (WCET)
- Potentiel important: problèmes d'optimisation et de recherche d'extremums

Approches hamiltoniennes et lagrangiennes du calcul quantique potentiellement moins forts que les approches numériques, avec toutefois des voies tracées claires :

- Recherche Opérationnelle
- Configuration des molécules (e.g. protéines), autres simulations physiques
- Potentiellement: IA (apprentissage ML), autres problèmes a priori combinatoires (WCET)
- Potentiel important: problèmes d'optimisation et de recherche d'extremums

Avec aussi des inconvénients

- Autre façon d'appréhender les problèmes à résoudre
- D-Wave:
  - Entre le marteau (temps de relaxation adiabatique) et l'enclume (temps de cohérence)
  - Résultats plus faibles que QC numérique (donc plus de qubits requis)



**Merci de votre attention**