

JFRO « INFORMATIQUE QUANTIQUE »

L'INFORMATIQUE QUANTIQUE AU SERVICE DE L'OPTIMISATION COMBINATOIRE

CAMILLE GRANGE

DOCTORANTE CIFRE : LIRMM / SNCF

10 FÉVRIER 2022, ENSIIE



PLAN DE LA PRÉSENTATION

1. **Algorithmes quantiques** pour l'optimisation combinatoire
2. Présentation de **QAOA**
3. **Simplification** et **reformulation** du problème SNCF étudié en forme **QUBO**
4. Analyse des **résultats**
5. **Conclusion**

PLAN DE LA PRÉSENTATION

1. **Algorithmes quantiques pour l'optimisation combinatoire**
2. Présentation de QAOA
3. Simplification et reformulation du problème SNCF étudié en forme QUBO
4. Analyse des résultats
5. Conclusion

ALGORITHMES QUANTIQUES D'OPTIMISATION COMBINATOIRE

Quelles **différences** avec les algorithmes **classiques** ?

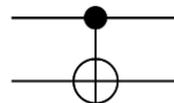
3 principes généraux :

Superposition : n qubits, superposition à 2^n états

$$\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x \in \{0,1\}^n} |x\rangle$$

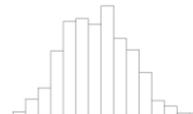
Superposition uniforme

Intrication : Portes quantiques à plusieurs qubits



Porte CNOT (2 qubits)

Mesure : Réduction du paquet d'onde
Echantillonnage pour évaluer l'état quantique



Distribution de probabilité

Théorème de non clonage :

Impossibilité de copier un état quantique quelconque

ALGORITHMES QUANTIQUES D'OPTIMISATION COMBINATOIRE

Aujourd'hui, quels **algorithmes quantiques** pour l'**optimisation combinatoire** ?

2 classes d'algorithmes :

Méta-heuristiques :

- ▶ QAOA (Quantum Approximate Optimization Algorithm)
- ▶ Quantum Annealing

Résolution exact :

- ▶ Algorithme de Grover
 - Recherche dans base non ordonnée
 - Besoin d'une transformation en problème d'optimisation

Implémentation :

Ordinateur quantique universel

Ordinateur quantique analogique

Ordinateur quantique universel



QAOA est le plus prometteur à court/moyen terme

PLAN DE LA PRÉSENTATION

1. Algorithmes quantiques pour l'optimisation combinatoire
- 2. Présentation de QAOA**
3. Simplification et reformulation du problème SNCF étudié en forme QUBO
4. Analyse des résultats
5. Conclusion

QUANTUM APPROXIMATE OPTIMIZATION ALGORITHM

Principe : trouver l'état quantique atteignant le minimum d'énergie pour un Hamiltonien donné, en faisant varier les paramètres qui contrôlent l'état quantique.

En **entrée** de QAOA :

Problème encodé comme Hamiltonien H (matrice hermitienne) tel que :

- Valeurs propres de H = valeurs de la fonction objectif
- Solution optimale = vecteur propre associé à la valeur propre minimale λ^* de H

$$H = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_{2^n} \end{pmatrix}$$

$$H = \sum_{i=1}^n h_i \sigma_i^z + \sum_{i < j} J_{ij} \sigma_i^z \otimes \sigma_j^z$$

porte quantique de Pauli Z sur qubit i

⇒ On cherche vecteur propre associé à $\lambda^* = \min_{i=1, \dots, 2^n} \lambda_i$

QUANTUM APPROXIMATE OPTIMIZATION ALGORITHM

Forme de l'Hamiltonien :
$$H = \sum_{i=1}^n h_i \sigma_i^z + \sum_{i < j} J_{ij} \sigma_i^z \otimes \sigma_j^z$$

⇒ Nécessité de formuler notre problème d'optimisation :

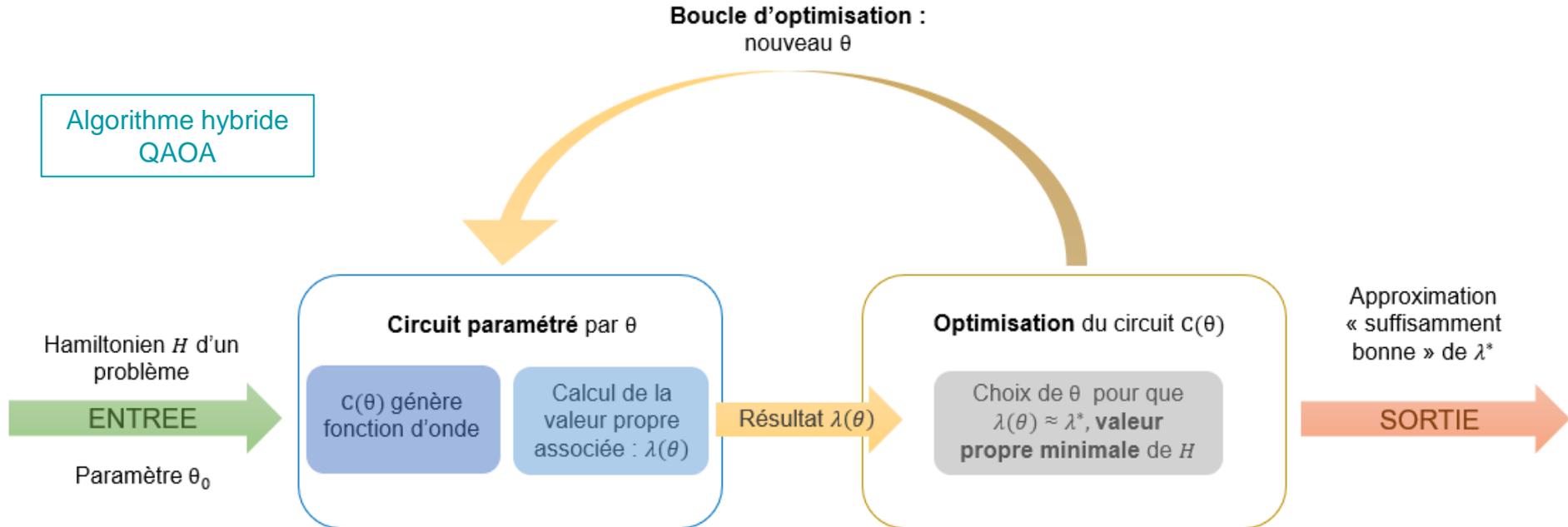
Sous forme Ising :
$$\min_z \sum_{i=1}^n h_i z_i + \sum_{i < j} J_{ij} z_i z_j \quad \text{avec } z \in \{-1, 1\}^n$$

Sous forme QUBO :

$$\min_x \sum_{i,j=1}^n c_{ij} x_i x_j \quad \text{avec } x \in \{0, 1\}^n$$

QUANTUM APPROXIMATE OPTIMIZATION ALGORITHM

- **Circuit quantique** $C(\theta)$ paramétré par le vecteur θ basé sur la description de l'Hamiltonien H du problème à résoudre
- Itératif sur θ : le circuit génère une fonction d'onde $|\psi(\theta)\rangle = C(\theta)|0\rangle$
 θ est modifié par un **méta-algorithme classique d'optimisation** afin de minimiser $\langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle = \lambda(\theta)$



PLAN DE LA PRÉSENTATION

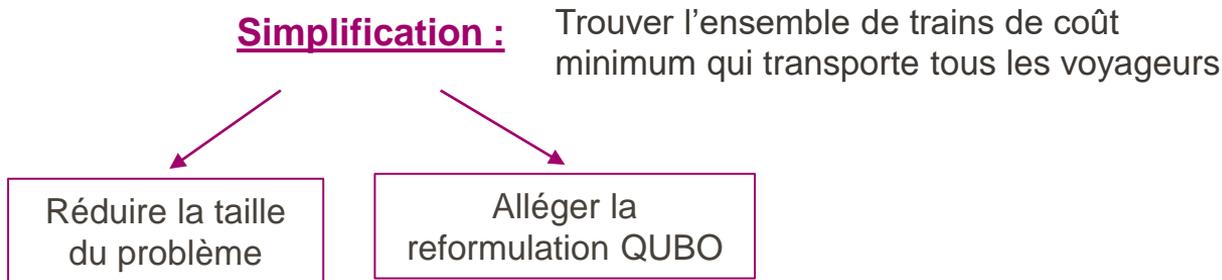
1. Algorithmes quantiques pour l'optimisation combinatoire
2. Présentation de QAOA
- 3. Simplification et reformulation du problème SNCF étudié en forme QUBO**
4. Analyse des résultats
5. Conclusion

PROBLÈME SNCF

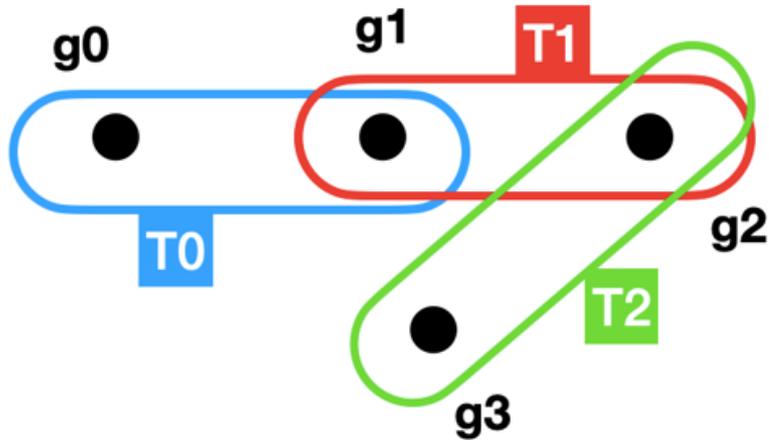
Problème SNCF étudié : **conception de plan de transport**

Données : Demande voyageurs (trajet + horaire souhaité)
Rames et disponibilité du réseau, avec coûts

Problème initial : Concevoir un plan de transport afin d'optimiser le coût économique (chiffre d'affaire VS charges de production)



EXEMPLE DU PROBLÈME SNCF SIMPLIFIÉ



Exemple avec **3 trains** (T)
4 groupes voyageurs (g)

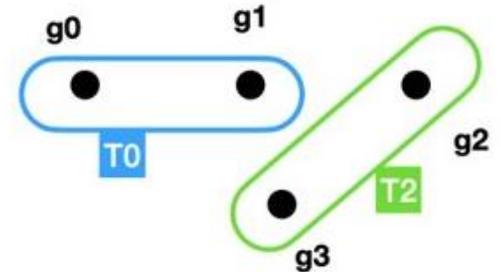


Solutions réalisables :

$(T_0, T_1, T_2) = (1, 1, 1)$ ou $(1, 0, 1)$

Solution optimale :

$(T_0, T_1, T_2) = (1, 0, 1)$



SIMPLIFICATION SET COVERING PROBLEM

Interprétation en **Set Covering Problem** (SCP) :

Données : Une collection de m éléments $\{e_1, \dots, e_m\}$ (*groupes voyageurs*)
 n subsets de ces éléments $\{S_1, \dots, S_n\}$, chacun pondéré par $w_i \in \mathbb{R}^+$ (*trains disponibles*)

Problème : Trouver l'ensemble de subsets de poids minimum qui couvrent tous les éléments

Formulation mathématique :

$$\min_{x \in \{0,1\}^n} f_{\text{SCP}}(x) = \sum_{i=1}^n w_i x_i \quad \text{s.c.} \begin{cases} \sum_{i=1}^n a_{ki} x_i \geq 1, & \forall k \in \llbracket 1, m \rrbracket \\ x_i \in \{0, 1\}, & \forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket \end{cases}$$

où

$$x_i = \begin{cases} 1 & \text{si } S_i \text{ est pris pour la couverture} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad a_{ki} = \begin{cases} 1 & \text{si } e_k \in S_i \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

REFORMULATION QUBO

- Transformation du problème SCP en **QUBO** (Quadratic Unconstrained Binary Optimisation) :

$$\min_{x \in \{0,1\}^n} x^T Q x, \text{ avec } n \in \mathbb{N} \text{ et } Q \in \mathcal{S}_{n,n}(\mathbb{R})$$

- Qu'est-ce qu'un bon QUBO ?

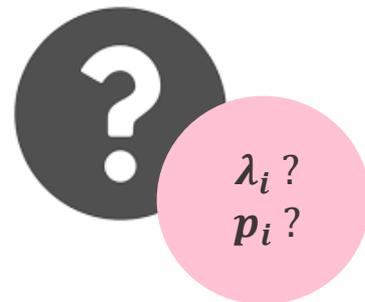
Propriété 1 : Garder l'ordre des solutions réalisables

Propriété 2 : Séparer domaine réalisable et non réalisable

⇒ Forme **paramétrée** avec **intégration des contraintes** :

$$f_{\text{QUBO},\lambda} = f_{\text{SCP}} + \underbrace{\sum_{i=1}^m \lambda_i p_i}_{\text{terme de pénalités des contraintes}}$$

coefficient de pénalités



REFORMULATION QUBO : PROPRIÉTÉ 1

Hypothèse forte : chaque élément est au maximum dans 2 subsets

Type de contrainte	Contrainte du SCP	Terme de pénalité quadratique du QUBO
Type (C1) : traduit qu'un élément qui est dans 1 subset	$x_i \geq 1$	$p_i(x) = -x_i + 1 = \begin{cases} 1 & \text{si } x \text{ viole la contrainte} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$
Type (C2) : traduit qu'un élément est dans 2 subsets	$x_i + x_j \geq 1$	$p_{i,j}(x) = -x_i - x_j + x_i x_j + 1 = \begin{cases} 1 & \text{si } x \text{ viole la contrainte} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$

$$f_{\text{QUBO},\lambda} = f_{\text{SCP}} + \lambda_1 \left(\sum_{i|S_i \in (C1)} p_i \right) + \lambda_2 \left(\sum_{(i,j)|(S_i,S_j) \in (C2)} p_{i,j} \right) \Rightarrow \text{Propriété 1 respectée}$$

= 0 pour solutions réalisables

REFORMULATION QUBO : PROPRIÉTÉ 2

Choix des paramètres numériques ? Pour simplifier, on choisit $\lambda_2 = \lambda_1$

Valeur max des solutions réalisables ?

$$0 \leq f_{\text{QUBO}, \lambda_1}(x) \leq \sum_{i=1}^n w_i \quad \Rightarrow$$

$$\text{Valeur max réalisable} = \sum_{i=1}^n w_i$$

Valeur min des solutions non réalisables ? Au moins 1 contrainte violée

$$f_{\text{QUBO}, \lambda_1} = f_{\text{SCP}} + \lambda_1 \left(\underbrace{\sum_{i|S_i \in (C1)} p_i + \sum_{(i,j)|(S_i, S_j) \in (C2)} p_{i,j}}_{\geq 1} \right) \Rightarrow \text{Valeur min non réalisable} = \lambda_1$$



Propriété 2 impose

$$\sum_{i=1}^n w_i < \lambda_1$$

REFORMULATION QUBO

QUBO du **Set Covering Problem** obtenu :

$$\min_{x \in \{0,1\}^n} \sum_{i=1}^n w_i x_i - \lambda_1 \left[\sum_{i | S_i \in (C1)} x_i + \sum_{(i,j) | (S_i, S_j) \in (C2)} (x_i + x_j - x_i x_j) \right] \text{ avec } \lambda_1 > \sum_{i=1}^n w_i$$

Pistes de nouvelles contraintes à intégrer :

- ▶ Contraintes générales du SCP : $\sum_{i=1}^k x_i \geq 1$ avec $k \in \llbracket 1, n \rrbracket$
- ▶ Capacité maximale des trains (implique assignation des voyageurs)
- ▶ Incompatibilité entre des trains ...

PLAN DE LA PRÉSENTATION

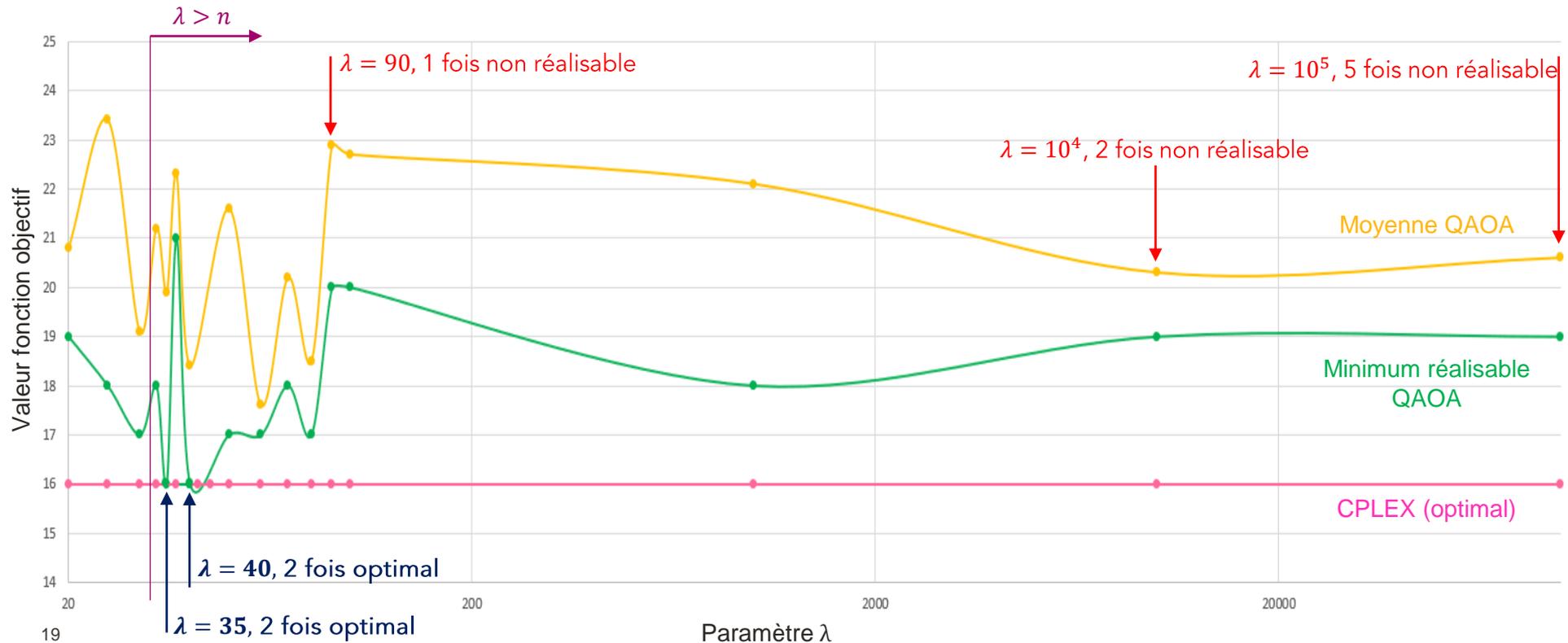
1. Algorithmes quantiques pour l'optimisation combinatoire
2. Présentation de QAOA
3. Simplification et reformulation du problème SNCF étudié en forme QUBO
- 4. Analyse des résultats**
5. Conclusion

ANALYSE

Valeurs moyenne/min de QAOA (COBYLA, $p = 3$)
en fonction de λ sur 10 runs sur simulateur IBM

Instance :

32 trains (tous de coût 1)
40 groupes voyageurs
avec $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$
Propriété 2 : $\lambda > n = 32$



PLAN DE LA PRÉSENTATION

1. Algorithmes quantiques pour l'optimisation combinatoire
2. Présentation de QAOA
3. Simplification et reformulation du problème SNCF étudié en forme QUBO
4. Analyse des résultats
- 5. Conclusion**

CONCLUSION

Importance du [travail de modélisation](#) :

- ▶ Simplification du problème initial
- ▶ Reformulation QUBO

Volonté d'intégrer de nouvelles contraintes pour [se rapprocher du problème initial](#) SNCF

[Quantifier](#) la qualité des propriétés QUBO

Contact : camille.grange@sncf.fr

MERCI POUR VOTRE ATTENTION !

Quelques [pistes bibliographiques](#) :

Nielsen, Michael A., and Isaac Chuang. "Quantum computation and quantum information." (2002): 558-559.

Nannicini, Giacomo. "An introduction to quantum computing, without the physics." *SIAM Review* 62.4 (2020): 936-981.

Farhi, Edward, et al. "Quantum computation by adiabatic evolution." arXiv preprint quant-ph/0001106 (2000).

Farhi, Edward, Jeffrey Goldstone, and Sam Gutmann. "A quantum approximate optimisation algorithm." arXiv preprint arXiv:1411.4028 (2014).

Grover, Lov K. "A fast quantum mechanical algorithm for database search." Proceedings of the twenty-eighth annual ACM symposium on Theory of computing. 1996.

ANNEXES

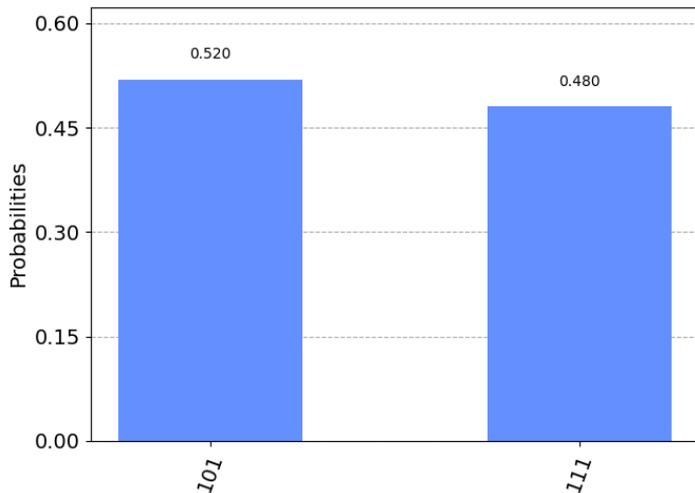
RÉSULTATS : BRUIT DES ORDINATEURS

Illustration du bruit des ordinateurs quantiques actuels

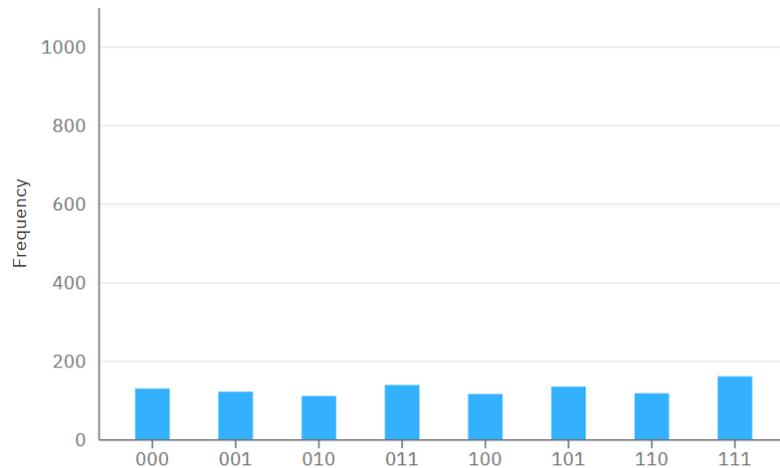
Circuit quantique où chaque qubit passe par 100 portes
Taux d'erreur d'une porte $\approx 10^{-2}$



Taux d'erreur = $1 - (1 - \tau)^{n_{portes}}$
62% d'erreur pour chacun des 15 qubits !



Simulateur classique IBM
32 qubits

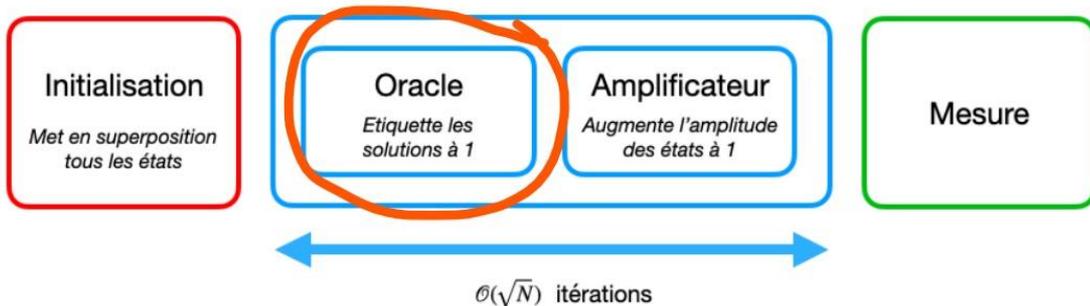


Ordinateur quantique IBM
'Montreal' 27 qubits, 128 QV

ALGORITHME EXACT DE RECHERCHE

Algorithme de Grover : implémenté sur ordinateurs à portes quantiques

Recherche dans une base non ordonnée : accélération quadratique par rapport à la recherche classique



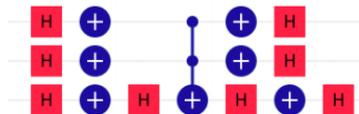
Codage de l'**oracle** sur circuit quantique :

$$f : \{0, 1\}^n \longrightarrow \{0, 1\}$$

$$f(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \text{ est solution} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$



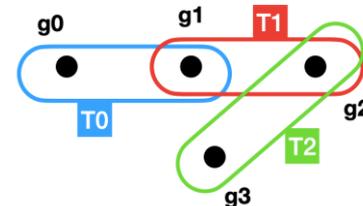
Reformulation du modèle de couverture par ensembles en **problème SAT**



Exemple de circuit quantique

RÉSULTATS SUR EXEMPLE PRÉCÉDENT

Travail de reformulation du modèle de couverture par ensembles :

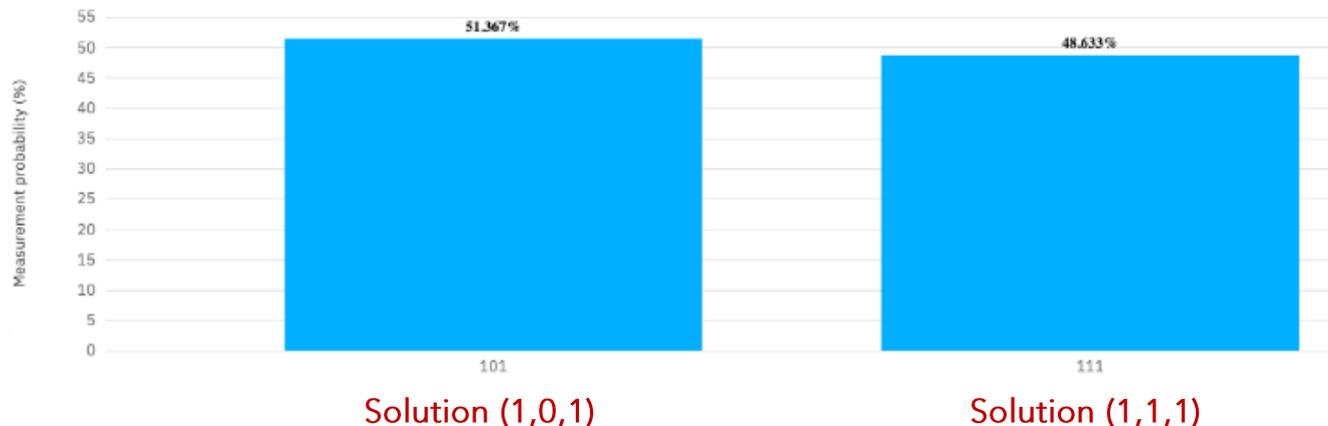


Formule SAT :

$$(t_0 \vee t_1 \vee t_2) \wedge (t_0 \vee \bar{t}_1 \vee t_2) \wedge (t_0 \vee t_1 \vee \bar{t}_2) \wedge (t_0 \vee \bar{t}_1 \vee \bar{t}_2) \wedge (\bar{t}_0 \vee t_1 \vee t_2) \wedge (\bar{t}_0 \vee \bar{t}_1 \vee t_2)$$

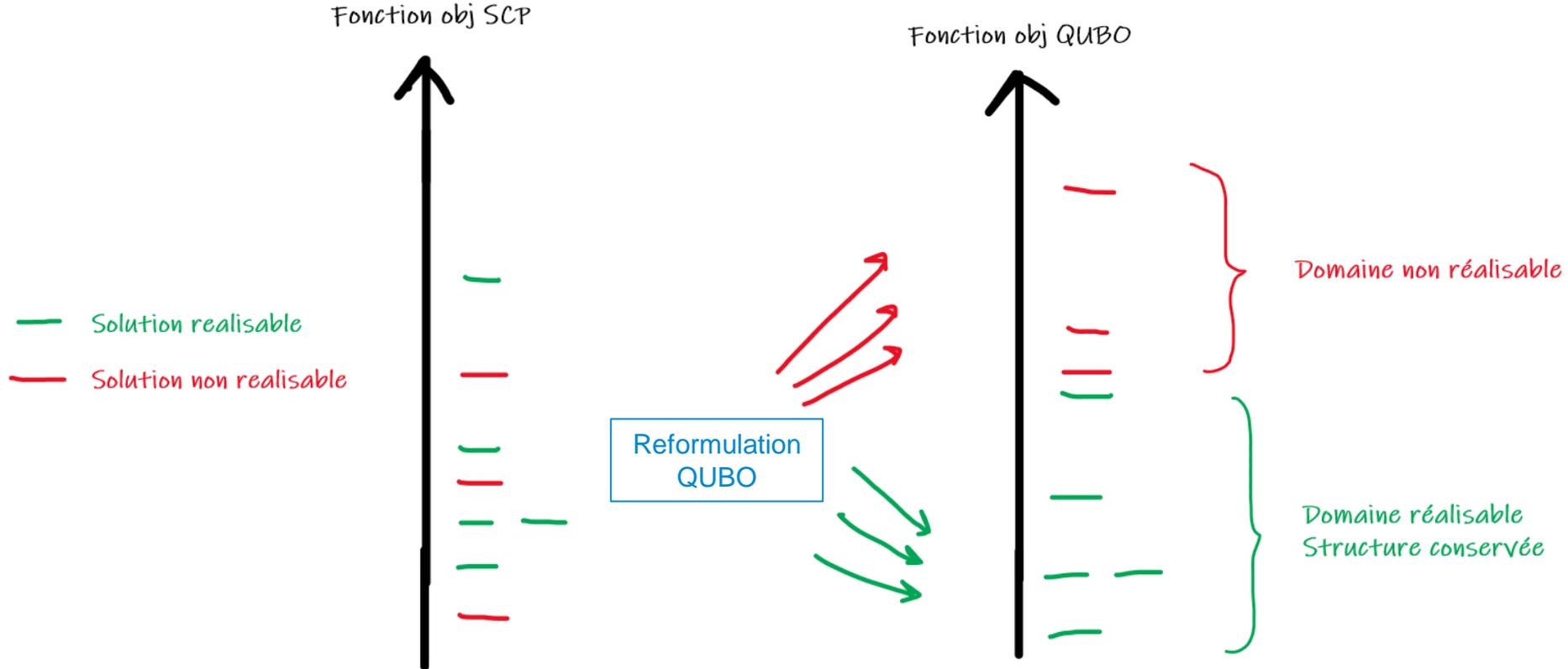
Problème : Trouve
TOUTES les couvertures.

➔ Plusieurs idées pour
trouver la solution optimale
(itérations, valeur seuil
etc...)



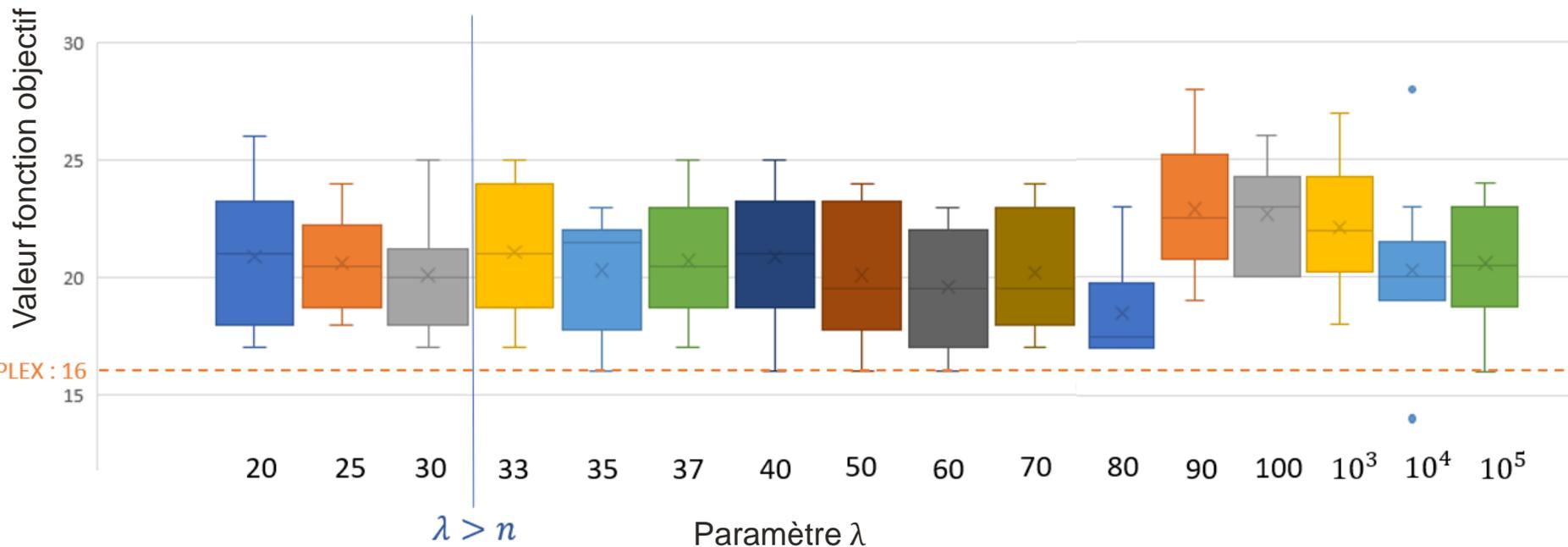
Simulateur IBM d'un ordinateur universel à
32 qubits. Temps exécution : 11 ms

REFORMULATION QUBO : DÉFINITION



RÉSULTATS : QAOA POUR SCP

Graphe des valeurs de 10 runs de QAOA pour chaque λ :



REFORMULATION QUBO

- Transformation du problème SCP en **QUBO** (Quadratic Unconstrained Binary Optimisation) :

$$\min_{x \in \{0,1\}^n} x^T Q x, \text{ avec } n \in \mathbb{N} \text{ et } Q \in \mathcal{S}_{n,n}(\mathbb{R})$$

- Qu'est-ce qu'un bon QUBO ?

Forme **paramétrée** avec **intégration des contraintes** :

$$f_{\text{QUBO},\lambda} = f_{\text{SCP}} + \underbrace{\sum_{i=1}^m \lambda_i p_i}_{\text{terme de pénalités des contraintes}}$$

↗ coefficient de pénalités

Propriété 1 : Garder l'ordre des solutions réalisables (domaine réalisable F)

$$\forall (x_1, x_2) \in \mathcal{F}^2, \quad f_{\text{SCP}}(x_1) \geq f_{\text{SCP}}(x_2) \implies f_{\text{QUBO},\lambda}(x_1) \geq f_{\text{QUBO},\lambda}(x_2)$$

Propriété 2 : Séparer domaine réalisable et non réalisable

$$\max_{x \in \mathcal{F}} f_{\text{QUBO}}(x) < \min_{x \notin \mathcal{F}} f_{\text{QUBO}}(x)$$

RÉSULTATS : QAOA SUR SCP

SCP est NP-difficile (même avec hypothèse forte) :

2-approximation existe

$H(n)$ -approximation existe

Meilleure que $\ln(n)$ -approximation? NON (sauf si $P = NP$)

Comparaisons possibles avec résolution classique :

Relaxation continue

Relaxation Lagrangienne

Heuristique de recherche local d'ordre p