

# Quantum Approximation Optimization Algorithm (QAOA)

UE Informatique quantique et Recherche opérationnelle, ENSIIE

C. Grange, 2023

## 1 Algorithmes variationnels quantiques

Nous étudions ici la classe d'algorithmes variationnels quantiques. Il s'agit d'une classe incluse dans la classe d'algorithmes *hybrides*.

**Définition 1.1** (Algorithme hybride). *Un algorithme hybride est un algorithme qui utilise à la fois un ordinateur quantique et un ordinateur classique.*

**Définition 1.2** (Algorithme variationnel quantique). *Un algorithme variationnel quantique (VQA) alterne entre l'exécution d'un **circuit quantique paramétré** par  $\theta \in \mathbb{R}^d$  et l'optimisation de  $\theta$  par un **solveur d'optimisation classique**. Il s'agit d'une **heuristique**.*

Les problèmes que traite un VQA sont les problèmes combinatoires à variables binaires non contraints. Autrement dit, les problèmes de la forme

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

où  $f$  est polynomiale et  $n \in \mathbb{N}$  est le nombre de variables.

### 1.1 Partie quantique d'un VQA

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

- Circuit quantique = matrice unitaire  $U \in \mathcal{M}_{2^n}(\mathbb{C})$

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

On note  $|\psi(\theta)\rangle = U(\theta)|0\rangle^{\otimes n}$  l'état en sortie du circuit paramétré. C'est cet état que l'on échantillonne, pour un  $\theta$  donné, en mesurant  $N$  fois la sortie du circuit. Cela nous donne une distribution de probabilité sur  $\{0,1\}^n$  qui approxime l'état  $|\psi(\theta)\rangle$ .

Le circuit  $U$  est choisi de sorte à ce que la couverture de l'espace des solutions soit fine.

### 1.2 Partie classique d'un VQA

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

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

La fonction  $g$  est choisie de sorte à ce que minimiser  $g$  revienne à minimiser  $f$ .

La fonction  $g$  la plus fréquemment utilisée est la fonction moyenne : pour  $\theta \in \mathbb{R}^d$ ,

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

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

*En résumé* : Un VQA est entièrement décrit par le choix du circuit paramétré  $U$  (et donc implicitement par le choix du nombre de paramètres  $d$ ) ainsi que le choix de la fonction  $g$ . Pour  $U$ , on choisira un circuit facile à implémenter, avec un petit nombre de

paramètres et qui permet une couverture de l'espace correcte. Pour ce qui est de  $g$ , on la prendra continue (pour faciliter le travail du solveur d'optimisation classique) et telle que ses optimaux coïncident avec les optimaux de  $f$  (en termes de valeurs et de solutions).

## 2 Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA)

Dans cette partie, nous allons nous intéresser à un VQA particulièrement en vogue dans la communauté d'optimisation quantique, appelé Quantum Approximate Optimization Algorithm (QAOA). Il est initialement proposé par Farhi et Goldstone en 2014, sur le problème MAX-CUT. Le choix du circuit  $U$  provient du théorème adiabatique tandis que la fonction  $g$  est choisie comme la moyenne.

**Définition 2.1** (Théorème adiabatique). *Soit un système quantique à  $n$  qubits qui évolue selon l'équation de Schrödinger*

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

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

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

### 2.1 Reformulation du problème

Pour résoudre notre problème initial ( $P$ ), on encode la solution optimale comme l'état stable d'un Hamiltonien (constant)  $H_P$  qui va désormais représenter notre problème. Si on formule notre problème ( $P$ ) comme

$$\min_{z \in \{-1,1\}^n} \sum_{i=1}^n h_i z_i + \sum_{i < j} J_{ij} z_i z_j ,$$

alors on montre que l'Hamiltonien associé est

$$H_P = \sum_{i=1}^n h_i Z_i + \sum_{i < j} J_{ij} Z_i \otimes Z_j$$

où  $Z_i$  est la porte  $Z$  appliquée sur le qubit numéro  $i$ .

### 2.2 Circuit paramétré

Le circuit paramétré de QAOA alterne entre 2 blocs,  $e^{-i\gamma_i H_P}$  et  $e^{-i\beta_i H_B}$ , où

- $e^{-i\gamma_i H_P}$  est la porte unitaire associée à  $H_P$ , avec un angle  $\gamma_i \in \mathbb{R}$ :

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

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

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

Plus précisément, les **paramètres** sont  $(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}) = (\gamma_1, \dots, \gamma_p, \beta_1, \dots, \beta_p) \in \mathbb{R}^{2p}$ , où  $p \in \mathbb{N}^*$  est un méta-paramètre de QAOA. Le circuit est alors

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

A noter que pour  $p$  très grand, on tend vers l'application du théorème adiabatique, ce qui justifie le choix du circuit  $U$ .

La fonction  $g$ , définie comme la moyenne, est exactement la valeur moyenne de  $H_P$  :

$$g(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}) = \langle \psi(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}) | H_P | \psi(\boldsymbol{\gamma}, \boldsymbol{\beta}) \rangle .$$