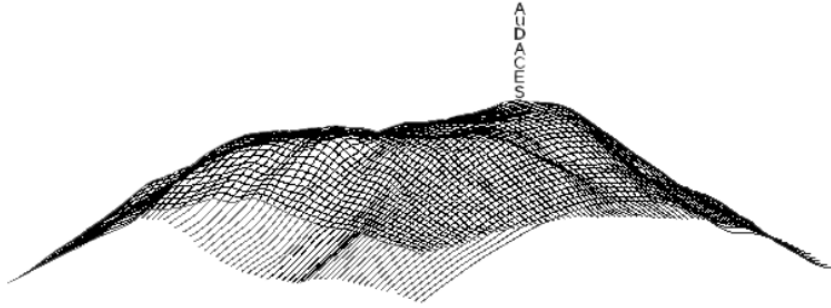




Rencontres **AuDACES**

AUvergne **D**éveloppement d'**A**pplications et **C**alcul en **E**nvironnement **S**cientifique

Résoudre des problèmes d'optimisation avec les
processeurs quantiques "adiabatiques"

1 juin 2023

Bogdan VULPESCU (Laboratoire de Physique de Clermont)

En trois temps

1. Le problème
2. La solution technique
3. La solution commerciale

"Solving a combinatorial optimization problem amounts to finding the 'best' or 'optimal' solution among a finite or countably infinite number of alternative solutions" [Papadimitriou & Steiglitz, *Combinatorial optimization : Algorithms and Complexity*, 1982].

Karp's 21 NP-Complete problems

https://en.wikipedia.org/wiki/Karp%27s_21_NP-complete_problems

"Reducibility among combinatorial problems" (Karp 1972)

SATISFIABILITY

INPUT: Clauses $C_1, C_2, \dots, C_p$

PROPERTY: The conjunction of the given clauses is satisfiable;
i.e., there is a set $S \subseteq \{x_1, x_2, \dots, x_n; \bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_n\}$ such that
a) S does not contain a complementary pair of literals
and b) $S \cap C_k \neq \emptyset$, $k = 1, 2, \dots, p$.

2-SAT $F = (x_1 \vee \bar{x}_2) \wedge (x_2 \vee \bar{x}_3) \wedge (x_3 \vee \bar{x}_4) \wedge (x_4 \vee \bar{x}_1)$; $C_1 = (x_1 \vee \bar{x}_2) \dots$

$\exists S = \{x_1, x_2, x_3, x_4; \bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3, \bar{x}_4\} \Rightarrow F(S) = \text{true} ?$

Les 21 problèmes

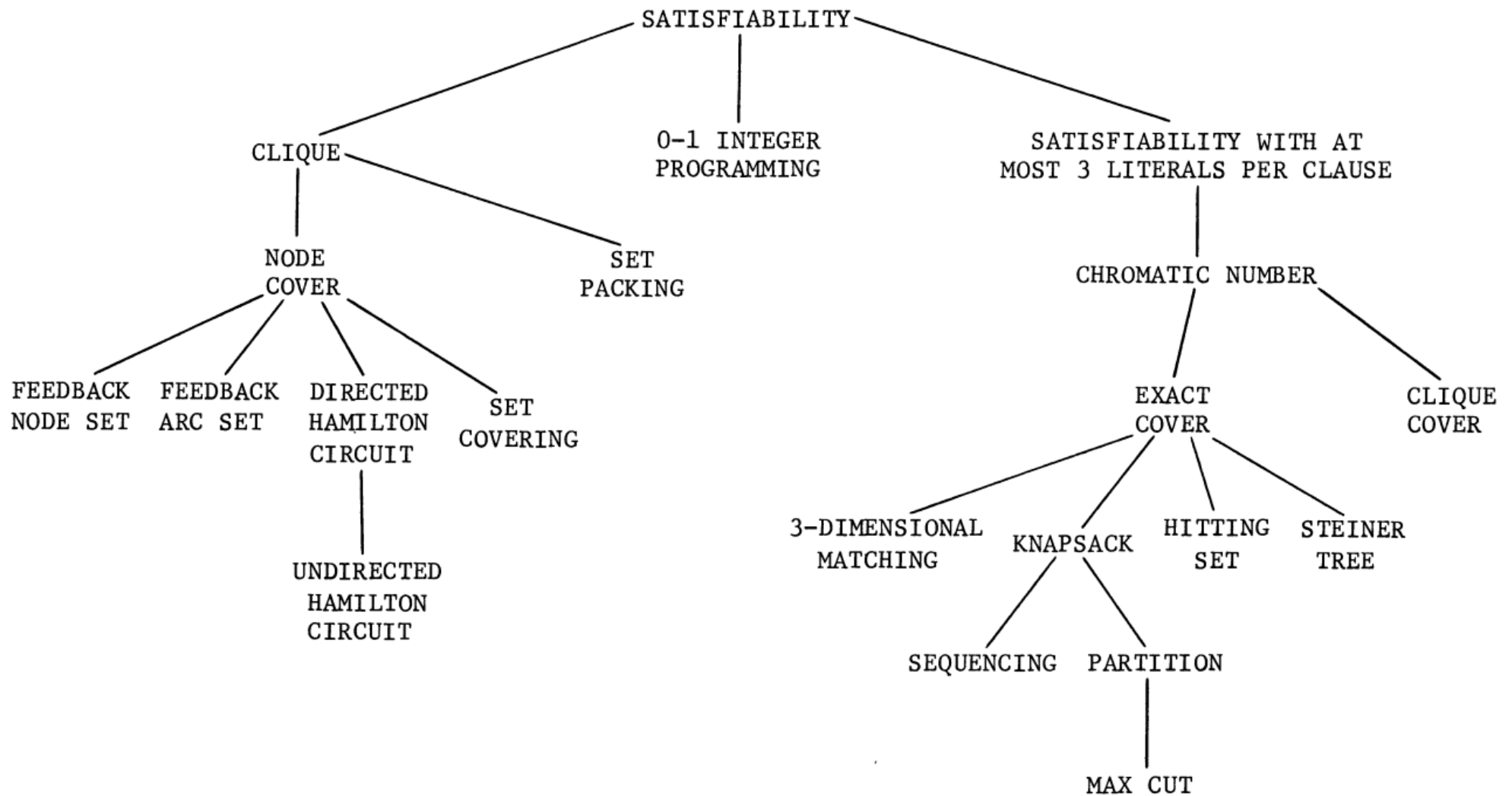
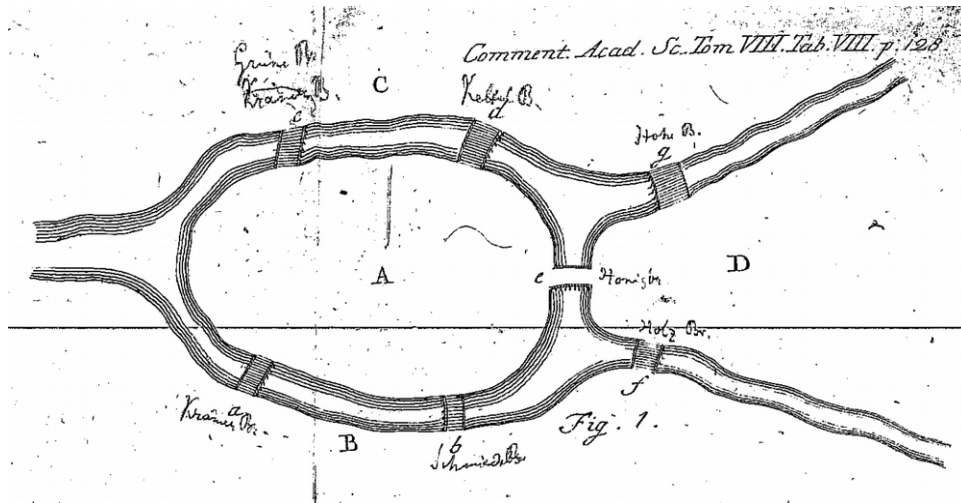


FIGURE 1 - Complete Problems

Les sept ponts de Königsberg (1736)



Solutio problematis ad geometriam situs pertinentis,

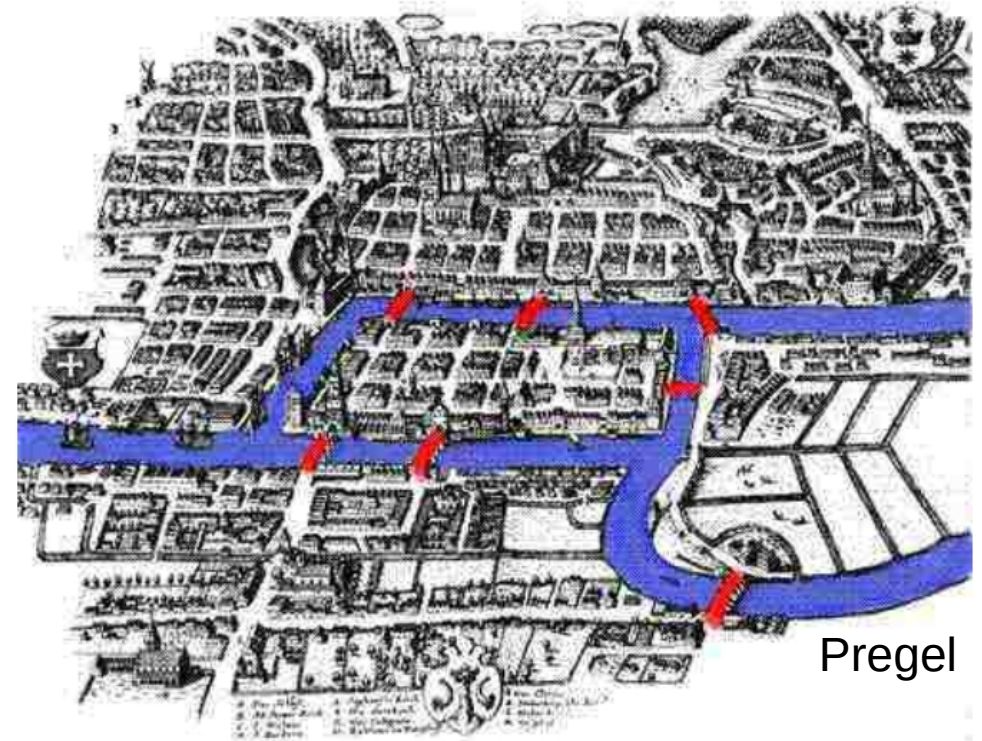
Leonhard Euler, 1741

<http://eulerarchive.maa.org/>

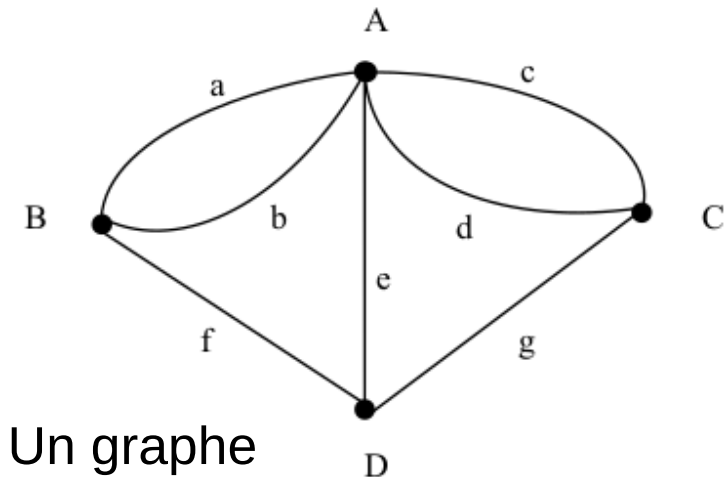
Existe-t-il un trajet, à partir d'un point au choix, qui **passe une seule fois par chacun des sept ponts et qui revient au point de départ** ?

Réponse : (dans ce cas) **NON**

Théorème de Euler : un graphe connexe admet un **cycle Eulérien** si et seulement si tous ses sommets sont de degré pair.



<https://mathshistory.st-andrews.ac.uk/Extras/Konigsberg/>



Un graphe

Le problème du voyageur de commerce

(Travelling Salesman Problem, TSP)

[...] est un problème d'optimisation qui consiste à déterminer, étant donné un ensemble de villes et les distances entre toutes les paires de villes, un **plus court circuit qui passe par chaque ville une et une seule fois**.

On ne connaît pas d'algorithme permettant de trouver une solution exacte rapidement dans tous les cas. Plus précisément, on ne connaît pas d'algorithme en temps polynomial. C'est un problème **NP-Hard**.

Une solution ne peut pas être vérifiée en temps polynomial, TSP n'est pas un problème NP.

Source : wikipedia, théorie de la complexité

solution pour TSP $\Rightarrow$ un **cycle Hamiltonian** de longueur minimale (coût minimal)

Heuristiques (méthodes)

... ne garantissent pas l'obtention de la solution optimale, mènent aux solutions **assez proches** de la solution optimale et **assez souvent**.

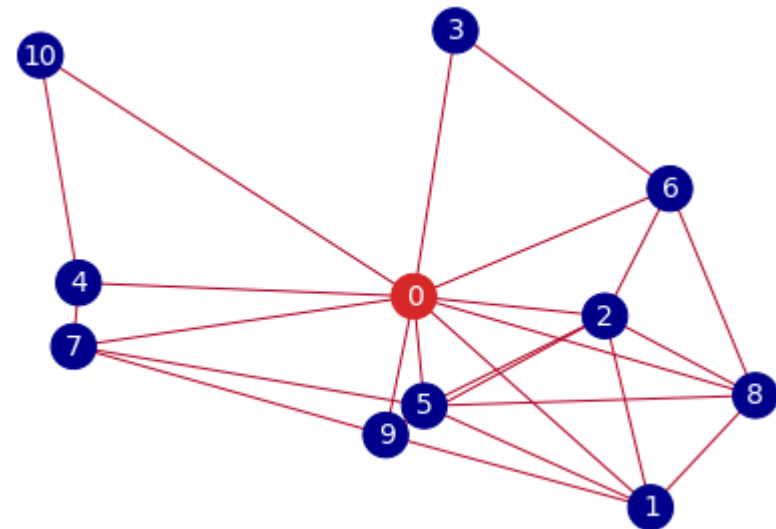
L'explosion combinatoire des solutions : pour N villes dans TSP, nous avons $(N - 1)!/2$ combinaisons pour les trajets candidats.

Exemple : l'**algorithme NN** (*nearest neighbour*, le plus proche voisin, un algorithme de type "greedy" - gourmand, avide, ...) = choisir pour l'étape suivante la ville la plus proche et pas encore visitée.

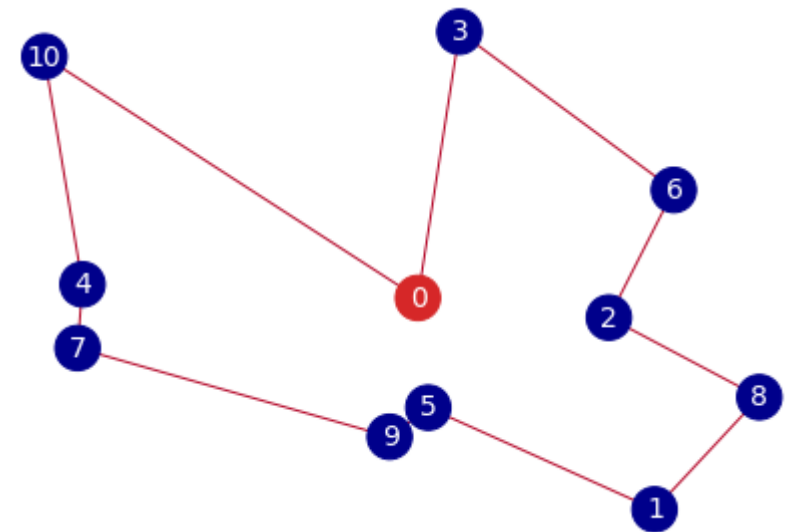
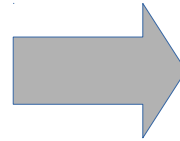
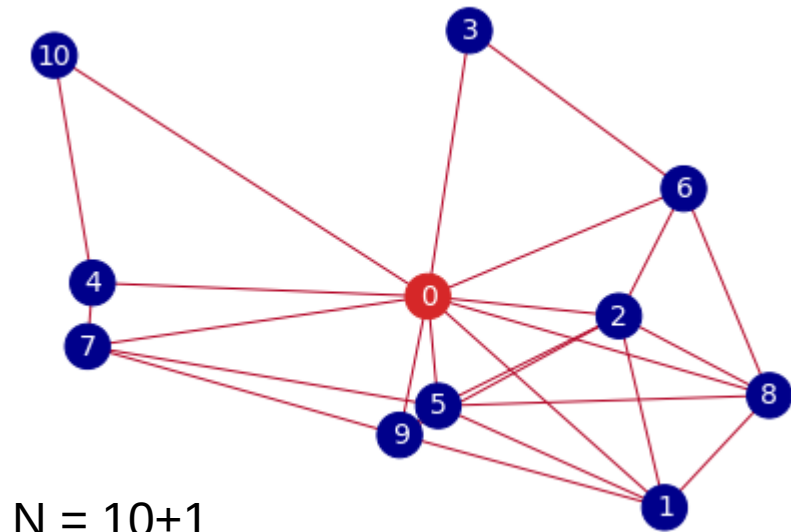
Problème : 10 + 1 villes

ville "0" = départ & arrivée

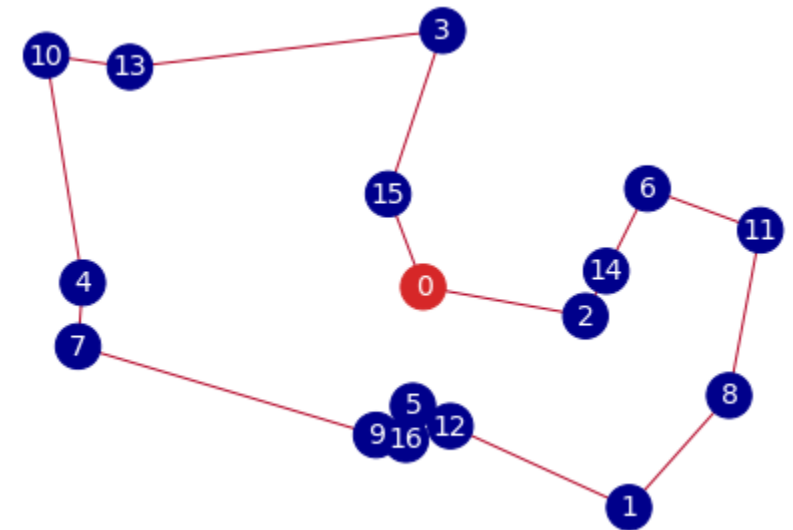
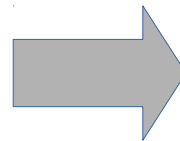
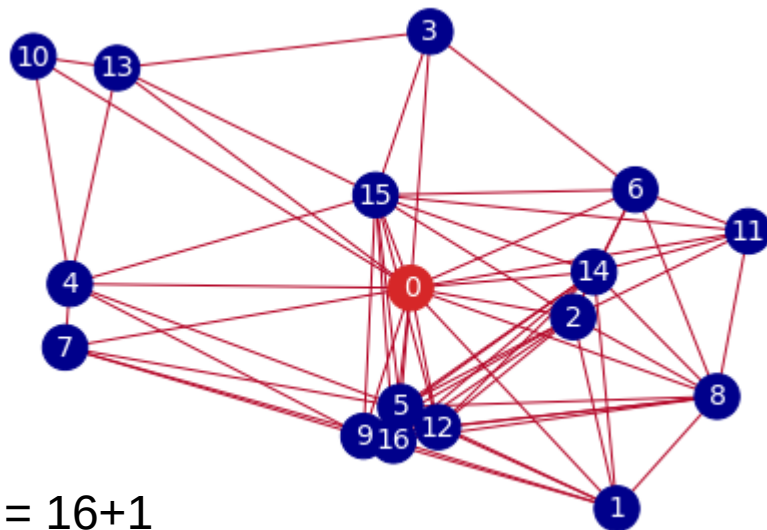
algorithme NN : 0-5-9-1-8-2-6-3-....



Le "CPLEX Optimizer" de IBM



N = 10+1



N = 16+1

($\Rightarrow$ c'est la limite avec CPLEX dans `qiskit_optimization.algorithms` !...)

Le calcul parallèle en tant que **calcul coopératif** et la **mémoire associative**

Mémoire associative (Content Addressable Memory) : un système physique qui évolue dans un espace des phases dominé par un nombre d'**états localement stables** (Hopfield 1982).

Un réseau (dense) de neurones : $V_i \in \{0, 1\}$, $T_{ij} = T_{ji}$, $T_{ii} = 0$

stocker des états V^s :
$$T_{ij} = \sum_s (2V_i^s - 1)(2V_j^s - 1) \quad ; \quad V^s, s = 1, \dots, n$$

retrouver un état stocké à

partir d'une information partielle : $V = V^s + \Delta V$;
$$V_i \rightarrow \begin{cases} 1, & \text{if } \sum_{j \neq i} T_{ij} V_j > U_i \\ 0, & \text{if } \sum_{j \neq i} T_{ij} V_j < U_i \end{cases}$$

chaque neurone, de façon **aléatoire** et **asynchrone**, évalue la possibilité de changement d'état (0 ou 1).

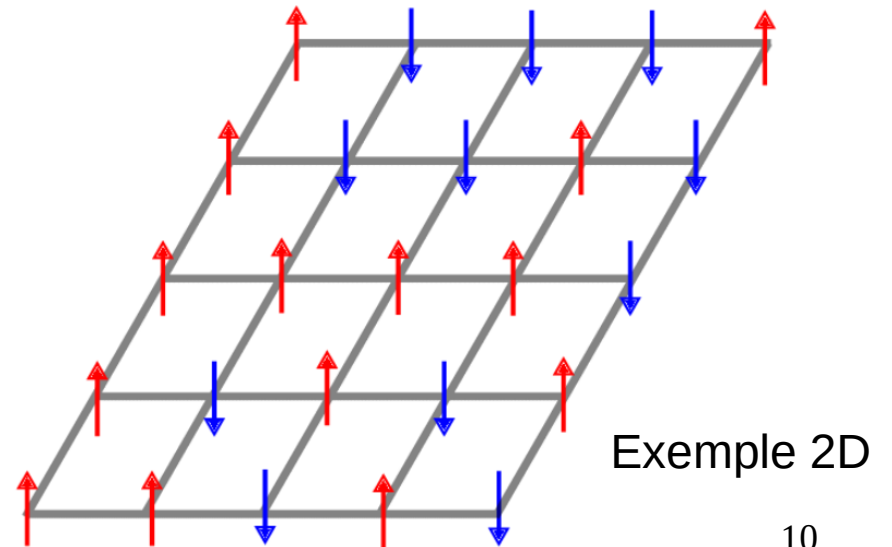
L'énergie du réseau

Définition :
$$E = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} T_{ij} V_i V_j \quad , \quad T_{ij} = T_{ji} \quad , \quad U_i = 0$$

Variation due au changement d'un seul neurone :
$$\Delta E = -\Delta V_i \sum_{j \neq i} T_{ij} V_j$$

La fonction E est monotone décroissante.

Ce réseau est équivalent (isomorphe) avec un système de spins qui interagissent entre eux et changent d'orientation de façon aléatoire (modèle Ising, verre de spins). La fonction d'énergie représente une propriété physique du système.



Le coup de pouce de la mécanique statistique

"Optimization by Simulated Annealing", Kirkpatrick, Gelatt, Vecchi (1983)

Summary. There is a deep and useful connection between statistical mechanics (the behavior of systems with many degrees of freedom in thermal equilibrium at a finite temperature) and multivariate or combinatorial optimization (finding the minimum of a given function depending on many parameters). A detailed analogy with

annealing = Le recuit d'une pièce métallique ou d'un matériau est un procédé correspondant à un cycle de chauffage. Celui-ci consiste en une étape de montée graduelle en température suivie d'un refroidissement contrôlé. [Wikipedia]

L'algorithme Metropolis (1953) pour simuler l'évolution dynamique d'un système de N particules qui interagissent par des forces conservatives :

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, j \neq i}^N U(d_{ij})$$

Metropolis

⇒ Simuler une collection d'atomes en équilibre à une température T .

Dans chaque pas, un atome est choisi et effectue un déplacement aléatoire par rapport à sa position initiale. La nouvelle valeur de l'énergie est calculée.

$\Delta E \leq 0$ le déplacement de l'atome est accepté, la nouvelle configuration d'atomes devient le point de départ de l'étape suivante

$\Delta E > 0$ la probabilité pour accepter la nouvelle configuration d'atomes et donnée par : $P(\Delta E) = \exp(-\Delta E/kT)$

Au début la température T est choisie "haute", après un certain nombre de pas la température est diminuée et le processus se répète jusqu'à une nouvelle diminution de la température. Un critère de convergence met fin à la série de températures (le programme de recuit – annealing schedule).

La Machine Boltzmann

"A Learning Algorithm for Boltzmann Machines",
D.H.Ackley, G.E.Hinton,
T.J.Sejnowski (1985)

This paper presents a type of parallel constraint satisfaction network which we call a “Boltzmann Machine” that is capable of learning the underlying constraints that characterize a domain simply by being shown examples from the domain. The network modifies the strengths of its connections so as to construct an internal *generative* model that produces examples with the same probability distribution as the examples it is shown. Then, when shown any particular example, the network can “interpret” it by finding values of the variables in the internal model that would generate the example. When shown a partial example, the network can complete it by finding internal variable values that generate the partial example and using them to generate the remainder. At present, we have an interesting mathematical

Échapper aux minima locaux en permettant une certaine proportion de bruit dans l'évolution du système (contrairement aux méthodes de descente de gradient).

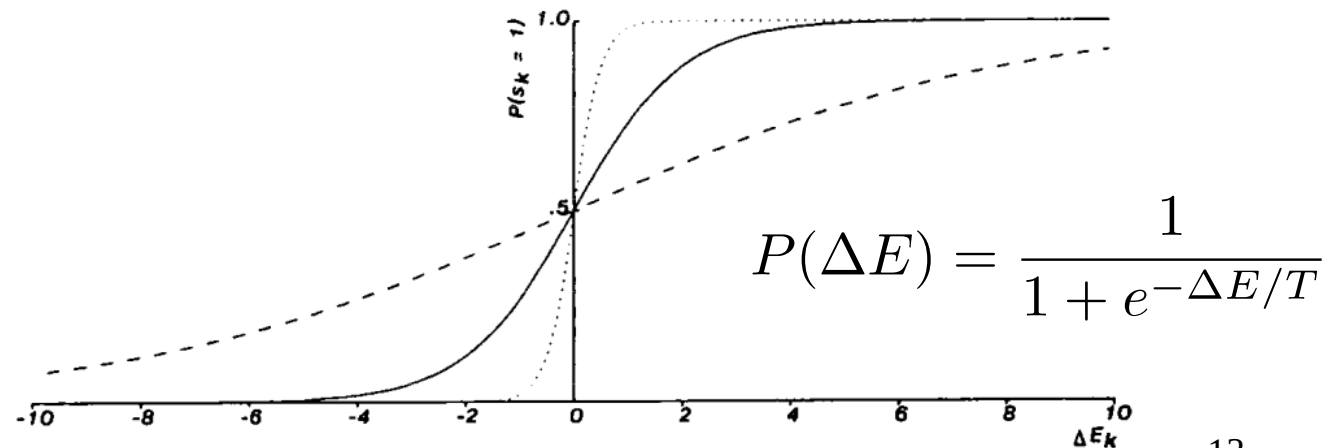


Figure 1. Eq. (5) at $T=1.0$ (solid), $T=4.0$ (dashed), and $T=0.25$ (dotted).

(une variation de Metropolis)

La trajectographie avec réseau de neurones

"Track Finding with Neural Networks", C.Peterson (1989)

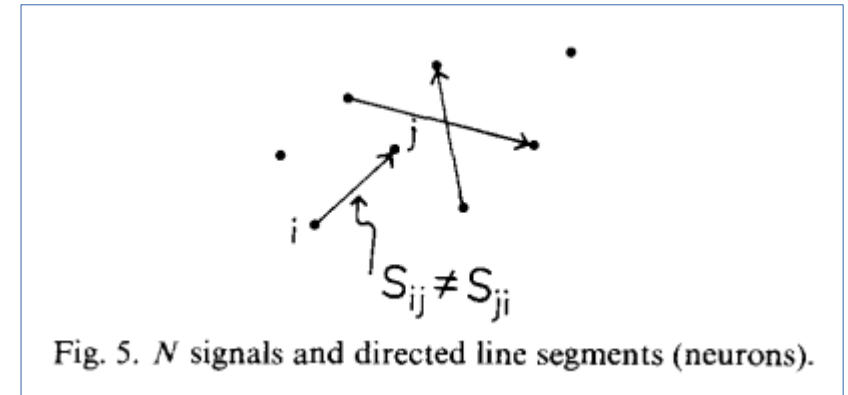
$$E = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} T_{ij} V_i V_j \Rightarrow$$

$$E = -\frac{1}{2} \sum_{ijkl} \left(T_{ijkl}^{(cost)} + T_{ijkl}^{(constraint)} \right) S_{ij} S_{kl}$$

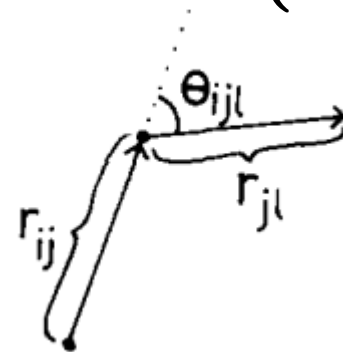
$S_{ij} = 1$ si le segment $i \rightarrow j$ fait partie de la trace.

$$T_{ijkl}^{(cost)} = \delta_{jk} \cos^m \theta_{ijl} / (r_{ij} + r_{jl})$$

$\Rightarrow$ minimiser les longueurs des segments connectés et l'angle entre les segments (m est pair).



$$\delta_{jk} = \begin{cases} 1, & j = k \\ 0, & j \neq k \end{cases}$$



La trajectographie avec réseau de neurones

$$T_{ijkl}^{(constraint)} = T_{ijkl}^{(1)} + T_{ijkl}^{(2)} \quad \left\{ \begin{array}{l} T_{ijkl}^{(1)} = -1/2\alpha [\delta_{ik}(1 - \delta_{jl}) + \delta_{jl}(1 - \delta_{ik})] \\ T_{ijkl}^{(2)} = -1/2\beta [\text{''inhibition globale''}] \end{array} \right.$$

α , β sont des multiplicateurs Lagrange

(1) pas de traces "bifurquées"

(2) la longueur des traces correspond au nombre de signaux du détecteur, N

$$E = -1/2 \sum \delta_{jk} [\cos^m \theta_{ijl} / (r_{ij} + r_{jl})] S_{ij} S_{kl} + 1/2\alpha \sum_{l \neq j} S_{ij} S_{il} \\ + 1/2\alpha \sum_{k \neq i} S_{ij} S_{kj} + 1/2\beta (\sum S_{kl} - N)^2$$

La reformulation QUBO : Quadratic Unconstrained Binary Optimization

$$E = \sum_{i=1}^N a_i V_i + \sum_{i=1}^N \sum_{j < i} b_{ij} V_i V_j \quad , \quad V_i \in \{0, 1\}$$

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_N \end{bmatrix} \quad , \quad x^T = [x_1 \ x_2 \ \dots \ x_N] \quad , \quad x_i \in \{0, 1\}$$

$$Q = \begin{bmatrix} q_{11} & q_{12} & \dots & q_{1N} \\ q_{21} & q_{22} & \dots & q_{2N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ q_{N1} & q_{N2} & \dots & q_{NN} \end{bmatrix}$$

$$\text{QUBO} = \text{minimiser / maximiser} : \quad y = x^T Q x$$

Obs :

$$x_i^2 = x_i$$

Le calcul quantique adiabatique

$$H = \sum_i h_i s_i + \sum_{j < i} J_{ij} s_i s_j$$

Énergie $\Rightarrow$ Hamiltonian du système, exprime l'interaction des qubits avec des sources externes plus l'interaction entre eux.

Chaque configuration $s = (0|1)^N$ correspond à une valeur de l'énergie ; il existe une valeur minimale = l'état fondamental (ground state).

Si on peut obtenir l'état fondamental du système de qubits, on peut mesurer les valeurs des qubits dans cet état et déterminer la solution optimale du problème formulé par le Hamiltonian.

Basé sur le **théorème adiabatique** (Born & Fock 1928), permet d'obtenir l'état fondamental inconnu, à partir d'un Hamiltonian avec état fondamental accessible.



The D-Wave Advantage quantum computer. | Photo: D-Wave

<https://www.dwavesys.com/>

advantage
ANNEALING & GATE

Leap

<https://cloud.dwavesys.com/leap/>

Ocean

<https://docs.ocean.dwavesys.com>

Qubits

#DWaveQubits

D:WAVE

D:WAVE

Qubits • COMPLEXITY
TO CLARITY

JAN 17 - 19

Johnson & Johnson : 3D cuboid loading problem

TECHNICAL PROBLEM DESCRIPTION FOR 3D CUBOID LOADING

OBJECTIVE:

- Load items¹ into cuboids² to improve (maximize) the space efficiency
- Maximize homogeneity in loading with respect to SKU distribution
- Optimize the distribution of cuboids sizes

KEY PROBLEM FEATURES/CONSTRAINTS:

- Model the arrangements and dimensions of items in 3D space
- Include support for all packed items
- Respect crushing limits
- Adhere to SKU-to-cuboid compatibility
- Respect weight capacity
 - Total packed weight
 - Weight limits for certain sections of the cuboid

Item¹ can be a single item or a cuboid other than the largest cuboid. For example:
Cuboid² can be a case, a shipper box, a gaylord, pallet, shipping container, truck trailer, or other.



DWave Qubits

#DWaveQubits

Johnson & Johnson

Pattison Food Group : scheduling problem

E-COMMERCE DRIVER AUTO-SCHEDULING (QEDA)

- Currently there are 100+ stores that have e-Commerce delivery
- Customers order online and receive a grocery delivery as early as the next day
- 3-4 people are dedicated to manually creating driver schedules each week

MOTIVATION: CAN WE CREATE THESE SCHEDULES AUTOMATICALLY, WHILE TAKING SCHEDULING RULES (SENIORITY, PREFERENCES/HISTORY, AND POLICIES) INTO ACCOUNT?

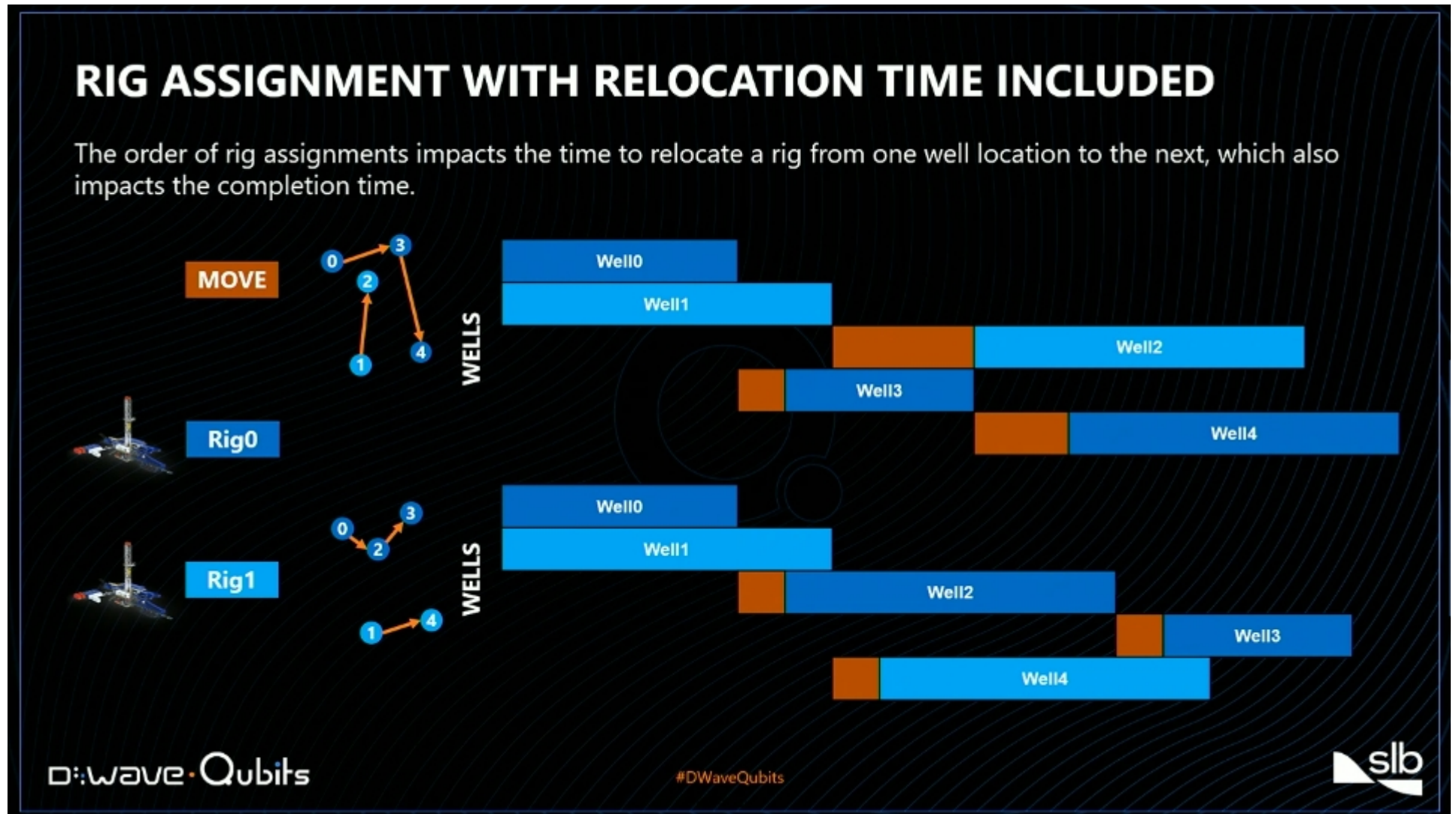


D:wave Qubits

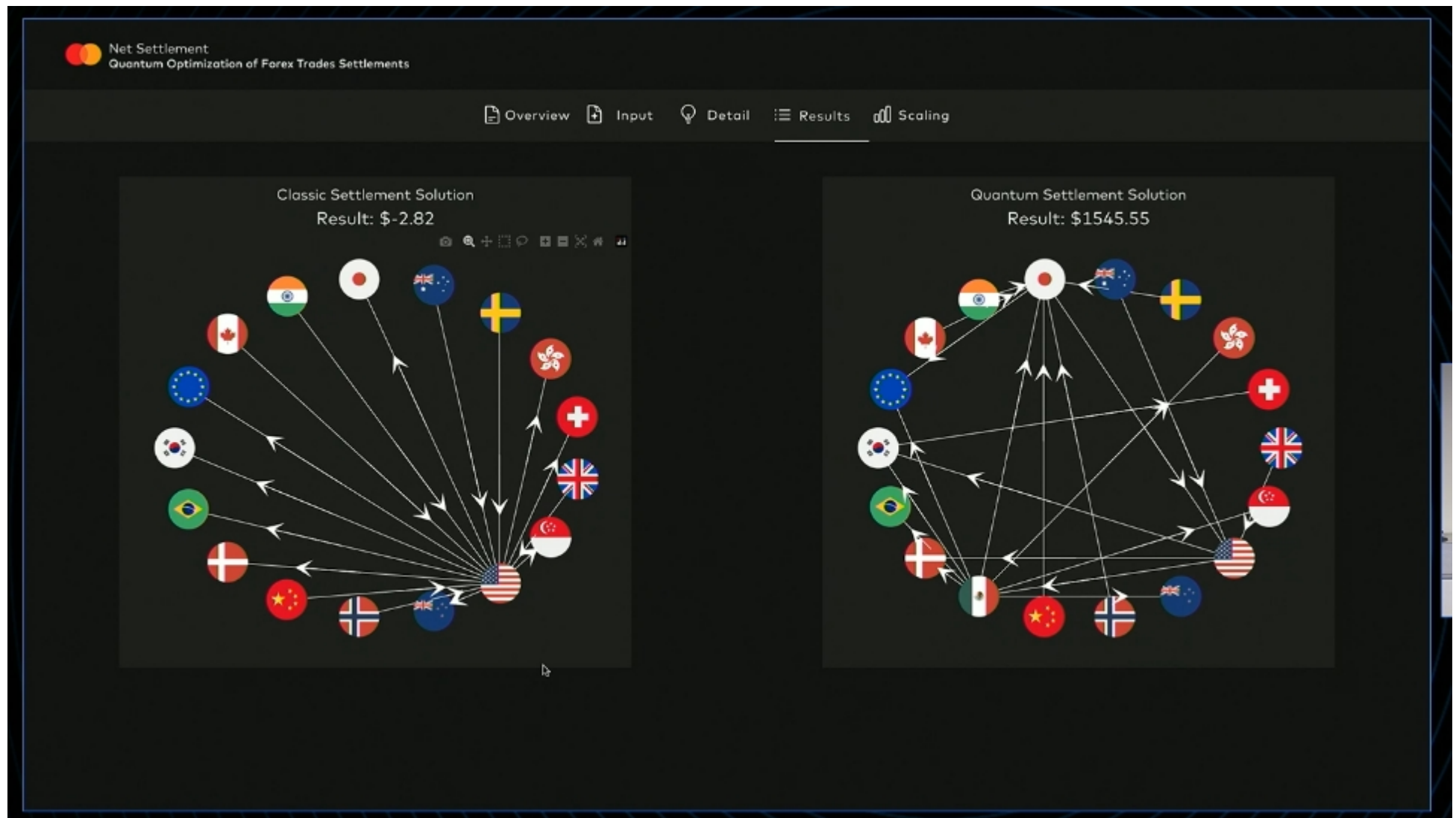
#DWaveQubits

Pattison Food Group

SLB (Schlumberger Ltd.) : logistic allocation



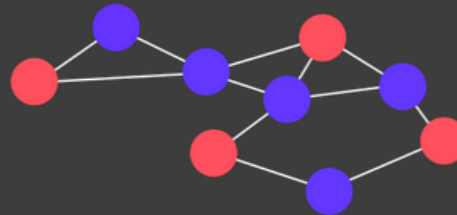
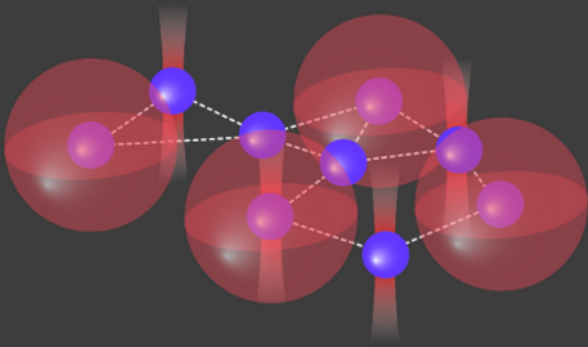
Mastercard : cross-border settlement





Finding the Maximum Independent Set

When two neutral atoms that are close to each other are simultaneously excited to Rydberg states, the so-called Rydberg blockade effect can happen, allowing only one atom to reach the excited state. One can use this effect to find the MIS of a graph, by encoding the graph into an array of neutral atoms. This encoding needs to be such that each two vertices of the graph that share an edge correspond to two atoms that are within the Rydberg radius from each other. When the total energy in the system is raised high enough to excite the maximum amount of atoms, the overall system state corresponds to a maximal independent set. One extracts the solution by measuring which atoms are excited and which are not. The set of excited atoms is an MIS. Read more about the Rydberg blockade and computation with Rydberg states.



Left: A maximal set of excited atoms, constrained by the Rydberg blockade.

Right: Highlighted in red: a maximal independent set of a graph (a maximal subset of vertices, so that none of the vertices share an edge).

<https://www.quera.com/>

256 qubits, en technologie
des atomes neutres

FPQA = Field-Programmable
Qubit Array

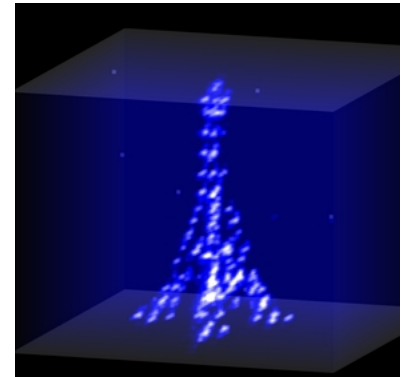


<https://www.pasqal.com/>



Fondée 2019

Cofondateur : Alain Aspect
(Nobel 2022)



Atomes neutres



Conclusion

Les applications de type "recuit quantique" représentent un champ d'utilisation des "processeurs" quantiques limité à une catégorie de problèmes qui impliquent l'optimisation combinatoire.

Ces problèmes ont importance pratique dans beaucoup de domaines ; des algorithmes "classiques" existent, mais il est difficile de les implémenter quand l'espace des solutions devient très large.

Les algorithmes quantiques adiabatiques sont moins sensibles au bruit des qubits que les algorithmes basés sur l'exécution des portes quantiques (gates).

Les QPU adiabatiques de quelques milliers de qubits sont aujourd'hui sur le marché, mais pas **off-the-shelf**.