

# LES HAMILTONIENS

# INTRODUCTION

Les Hamiltoniens sont des  
opérateurs mathématiques  
qui nous servent à  
représenter «l'énergie d'un  
système»

# INTRODUCTION

Les Hamiltoniens sont des opérateurs mathématiques qui nous servent à représenter «l'énergie d'un système»

$$H = E_c + E_p$$

Équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle$$

Constante de planck

$$\hbar \approx \frac{6.626 \times 10^{-34}}{2\pi} J \cdot s$$

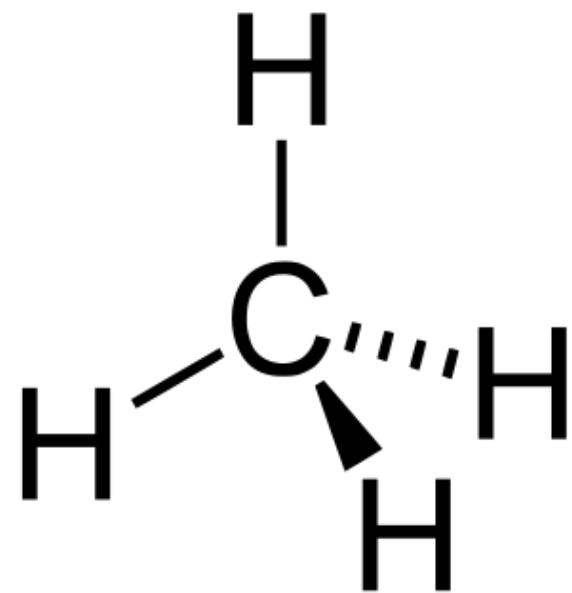
Hamiltonien

# C'EST QUOI UN SYSTÈME?



[https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/c/c4/TSP\\_Deutschland\\_3.png](https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/c/c4/TSP_Deutschland_3.png)

9



<https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/9/92/Methane-2D-stereo.svg/340px-Methane-2D-stereo.svg.png>

Un système peut revêtir une multitude de formes ; il se définit essentiellement par nos choix de paramètres. En d'autres termes, un système est ce que nous décidons de définir en fonction des éléments que nous considérons pertinents dans un contexte donné.

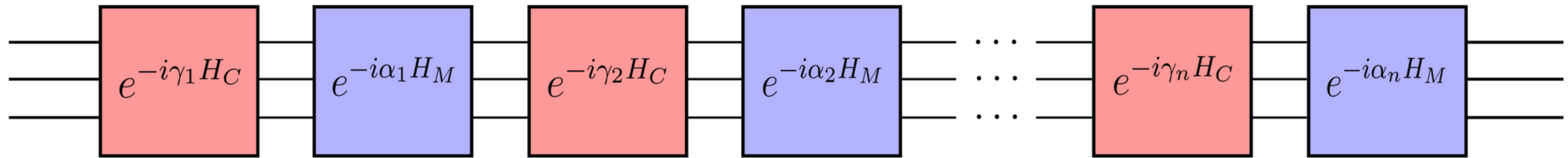
# À QUOI ÇA SERT?



Dans le monde du quantique  
nous sommes confrontés à  
des hamiltoniens dès que nous  
faisons un circuit.

- Ça représente un problème qui est contraint.
- Ça représente un ensemble de donnée liées entre eux.

# DANS QUEL CONTEXTE?



[https://pennylane.ai/\\_images/qaoa\\_circuit.png](https://pennylane.ai/_images/qaoa_circuit.png)

Nous retrouvons les Hamiltoniens dans différents contextes, mais principalement lors de l'utilisation de QAOA, VQE, QAA, etc.

Tous ces algorithmes ont une chose en commun : ils évaluent l'énergie du système

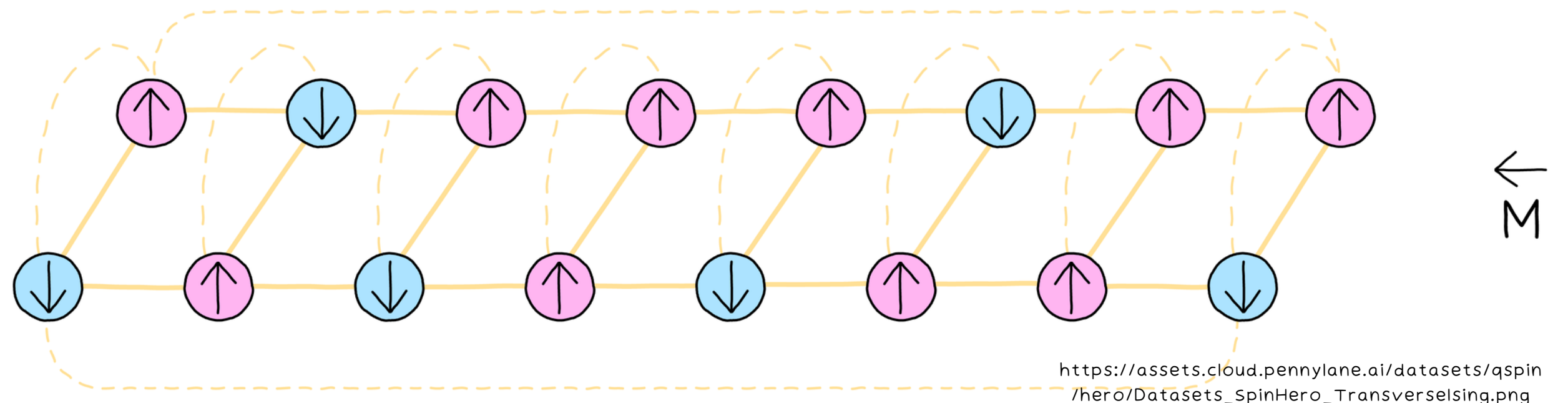
$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle$$

Pour ce faire, les matrices doivent être diagonalisables.

# MODÈLE D'ISING

Le modèle d'Ising est une représentation particulière d'un hamiltonien. Il utilise la polarité des aimants, représentée par les valeurs +1 ou -1, et les coefficients du modèle expriment la force des interactions entre les spins, permettant ainsi de décrire l'énergie totale du système en fonction de l'alignement des spins et de quantifier l'influence des interactions magnétiques.

$$H(\sigma) = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \mu \sum_j h_j \sigma_j$$



# COMMENT LIRE LES ÉQUATION D'UN HAMILTONIEN?

$$H_A = A \sum_{ij \in E} \sigma_i \sigma_j = ZZ$$

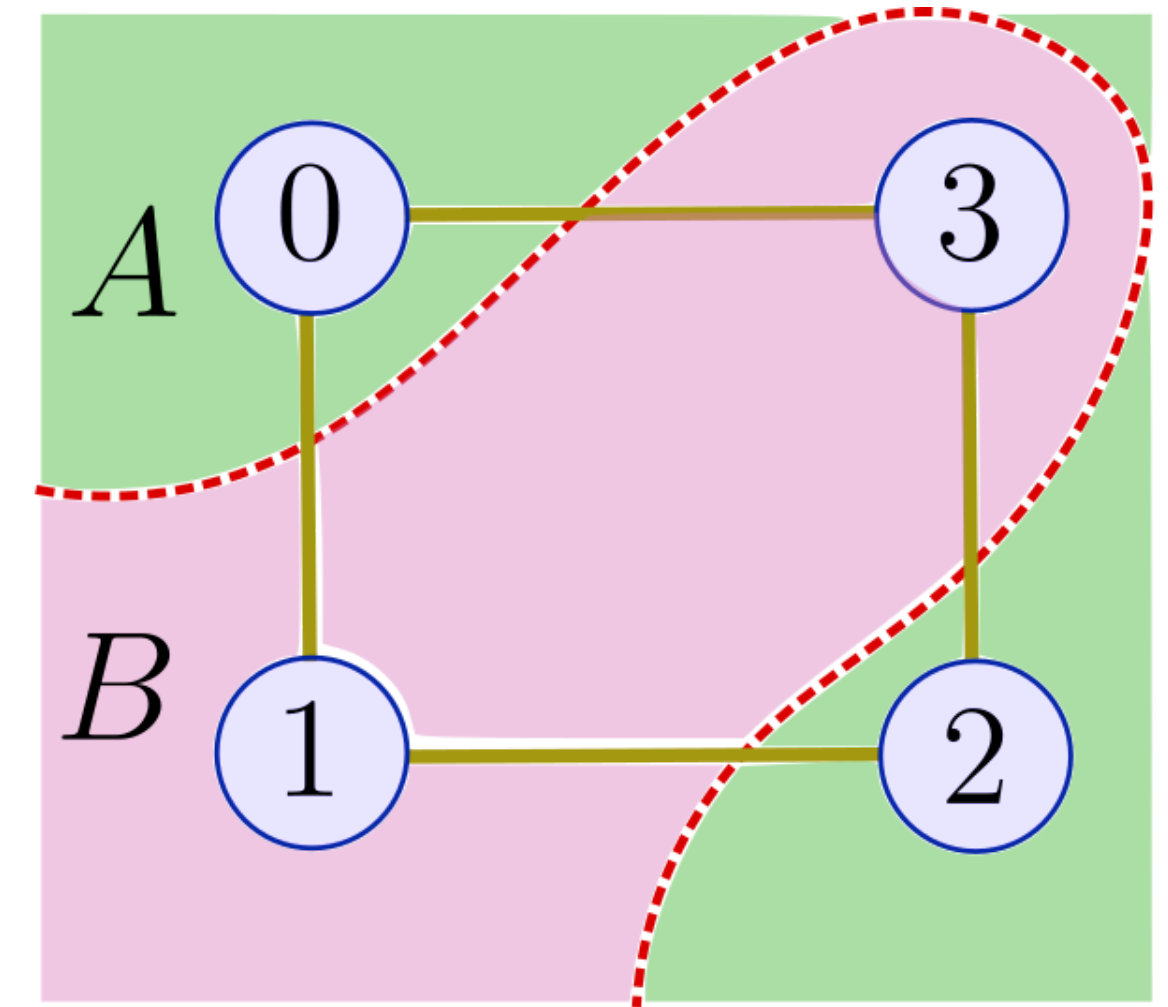
$$H_B = -B \sum_i \sigma_i = Z$$



# UN EXEMPLE;MAXCUT

Soit un graphe non orienté  $G = (V, E)$ , où  $V$  est l'ensemble des sommets et  $E$  est l'ensemble des arêtes. Chaque arête  $(i, j)$  est associée à un poids  $w_{ij}$  qui représente la valeur de cette arête.

L'objectif du problème MaxCut est de diviser l'ensemble des sommets  $V$  en deux ensembles disjoints  $S$  et  $\bar{S}$  de manière à maximiser la somme des poids des arêtes coupées, c'est-à-dire maximiser la somme des poids des arêtes ayant un sommet dans  $S$  et l'autre dans  $\bar{S}$ .



[https://pennylane.ai/\\_images/qaoa\\_maxcut\\_partition.png](https://pennylane.ai/_images/qaoa_maxcut_partition.png)

# L'HAMILTONIEN; MAXCUT

L'équations peut se  
réécrire comme suit :

$$H_A = A \left( \sum_{n=1}^N s_i \right)^2 \quad \longrightarrow$$

$$H_B = B \sum_{(uv) \in E} \frac{1 - S_u S_v}{2} \quad \longrightarrow$$

# L'HAMILTONIEN; MAXCUT

L'équations peut se  
réécrire comme suit :

$$H_A = A \left( \sum_{n=1}^N s_i \right)^2 \longrightarrow H_A = A \sum_{n=1}^N \mathbf{I}$$

$$H_B = B \sum_{(uv) \in E} \frac{1 - S_u S_v}{2} \longrightarrow$$

# L'HAMILTONIEN; MAXCUT

L'équations peut se  
réécrire comme suit :

$$H_A = A \left( \sum_{n=1}^N s_i \right)^2 \longrightarrow H_A = A \sum_{n=1}^N \mathbf{I}$$

$$H_B = B \sum_{(uv) \in E} \frac{1 - S_u S_v}{2} \longrightarrow H_B = B \sum_{(uv) \in E} \frac{1}{2} \sigma_z(u) \sigma_z(v)$$

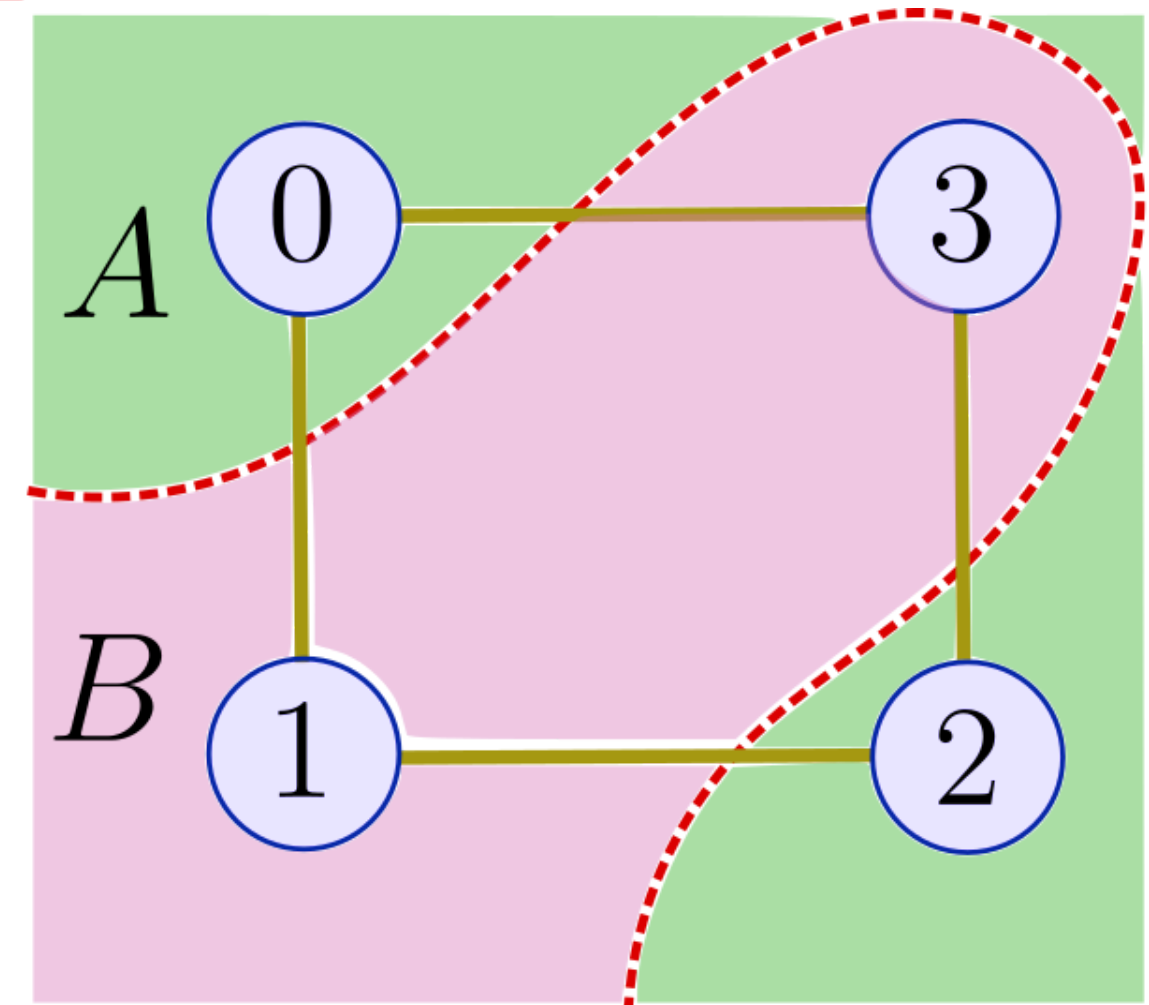
$$H = H_A + H_B$$

# CONVERTIR L'HAMILTONIEN EN CHAINE DE PAULI

$$H_A = A \sum_{n=1}^N \mathbf{I}$$



$$H_B = B \sum_{(uv) \in E} \frac{1}{2} \sigma_z(u) \sigma_z(v)$$



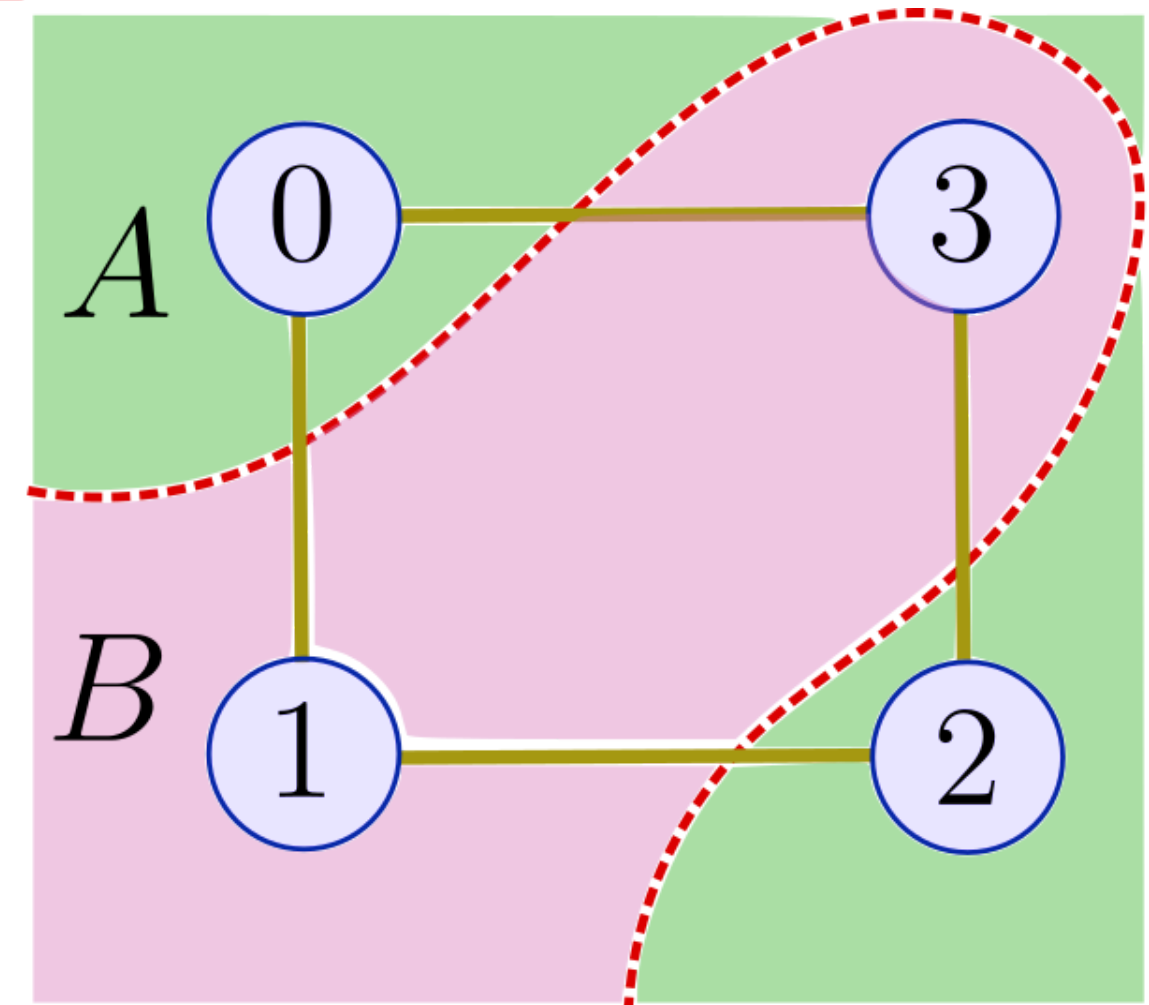
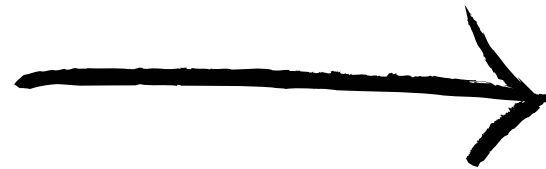
# CONVERTIR L'HAMILTONIEN EN CHAINE DE PAULI

$$H_A = A \sum_{n=1}^N \mathbf{I}$$



$(A^* \mathbf{I}) \mathbf{III} +$   
 $\mathbf{I} (A^* \mathbf{I}) \mathbf{II} +$   
 $\mathbf{II} (A^* \mathbf{I}) \mathbf{I} +$   
 $\mathbf{III} (A^* \mathbf{I})$

$$H_B = B \sum_{(uv) \in E} \frac{1}{2} \sigma_z(u) \sigma_z(v)$$



# CONVERTIR L'HAMILTONIEN EN CHAINE DE PAULI

$$H_A = A \sum_{n=1}^N \mathbf{I}$$

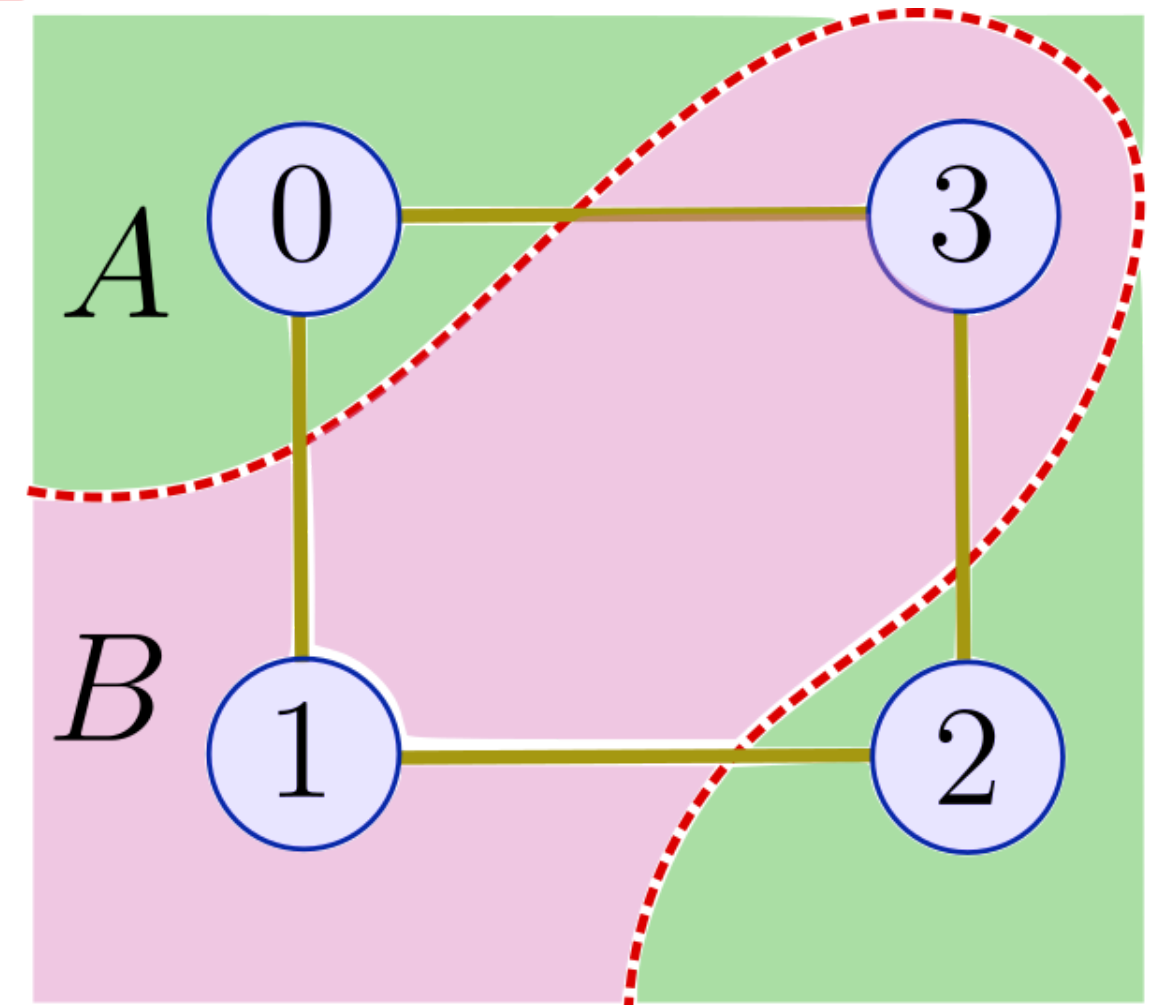


$$\begin{aligned} &(A^* \mathbf{I}) \mathbf{I} \mathbf{I} + \\ &\mathbf{I} (A^* \mathbf{I}) \mathbf{I} + \\ &\mathbf{I} \mathbf{I} (A^* \mathbf{I}) + \\ &\mathbf{I} \mathbf{I} \mathbf{I} (A^* \mathbf{I}) \end{aligned}$$

$$H_B = B \sum_{(uv) \in E} \frac{1}{2} \sigma_z(u) \sigma_z(v)$$



$$\begin{aligned} &(B^* \mathbf{Z} \mathbf{Z}) \mathbf{I} \mathbf{I} + \\ &B^* \mathbf{Z} \mathbf{I} \mathbf{I} \mathbf{Z} + \\ &\mathbf{I} (B^* \mathbf{Z} \mathbf{Z}) \mathbf{I} + \\ &\mathbf{I} \mathbf{I} (B^* \mathbf{Z} \mathbf{Z}) \end{aligned}$$



# CONVERTIR L'HAMILTONIEN EN CHAINE DE PAULI

$$H_A = A \sum_{n=1}^N \mathbf{I}$$

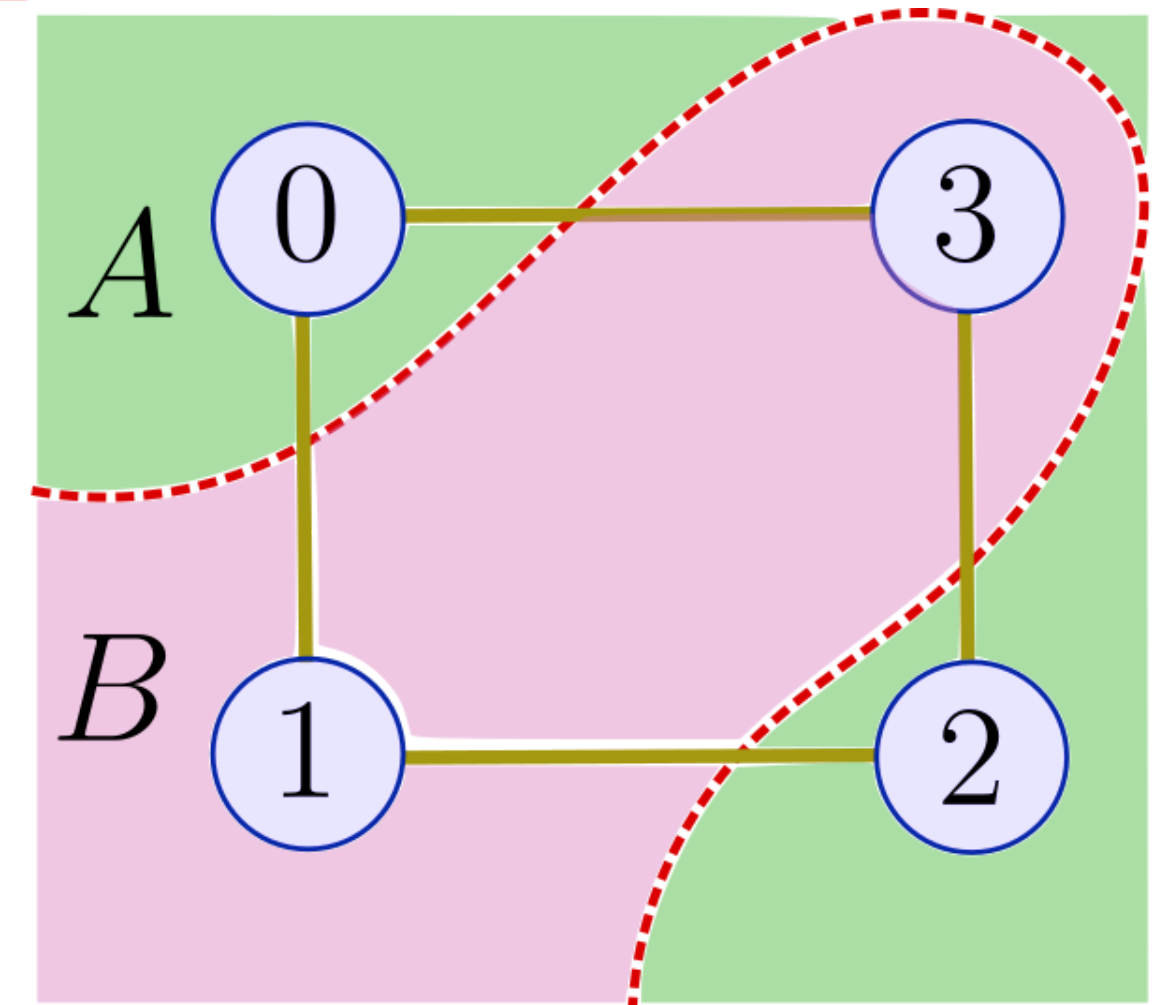


$$\begin{aligned} &(A^* \mathbf{I}) \mathbf{III} + \\ &\mathbf{I} (A^* \mathbf{I}) \mathbf{II} + \\ &\mathbf{II} (A^* \mathbf{I}) \mathbf{I} + \\ &\mathbf{III} (A^* \mathbf{I}) \end{aligned}$$

$$H_B = B \sum_{(uv) \in E} \frac{1}{2} \sigma_z(u) \sigma_z(v)$$



$$\begin{aligned} &(B^* \mathbf{ZZ}) \mathbf{II} + \\ &B^* \mathbf{ZII} \mathbf{Z} + \\ &\mathbf{I} (B^* \mathbf{ZZ}) \mathbf{I} + \\ &\mathbf{II} (B^* \mathbf{ZZ}) \end{aligned}$$



$$\text{Résultat} = 4^* A^* \mathbf{I} + (B^* \mathbf{ZZ}) \mathbf{II} + B^* \mathbf{ZII} \mathbf{Z} + \mathbf{I} (B^* \mathbf{ZZ}) \mathbf{I} + \mathbf{II} (B^* \mathbf{ZZ})$$



# COMMENT FAIRE DANS PENNYLANE?

```
import pennylane as qml
```

```
A = 0.5
```

```
B = 1/2
```

```
cost_h = qml.Hamiltonian(  
    [-A for e in G.nodes],  
    [qml.Identity(e) for e in G.nodes],  
) + qml.Hamiltonian(  
    [B for e in G.edges],  
    [qml.PauliZ(e[0]) @ qml.PauliZ(e[1]) for e in G.edges],  
)
```

```
Cost Hamiltonian      (-2.0) [I0]  
+ (0.5) [Z0 Z1]  
+ (0.5) [Z0 Z3]  
+ (0.5) [Z1 Z2]  
+ (0.5) [Z2 Z3]
```

Résultat =

$$4 * A * I +$$
$$(B * ZZ)II +$$
$$B * ZIIZ +$$
$$I(B * ZZ)I +$$
$$II(B * ZZ)$$

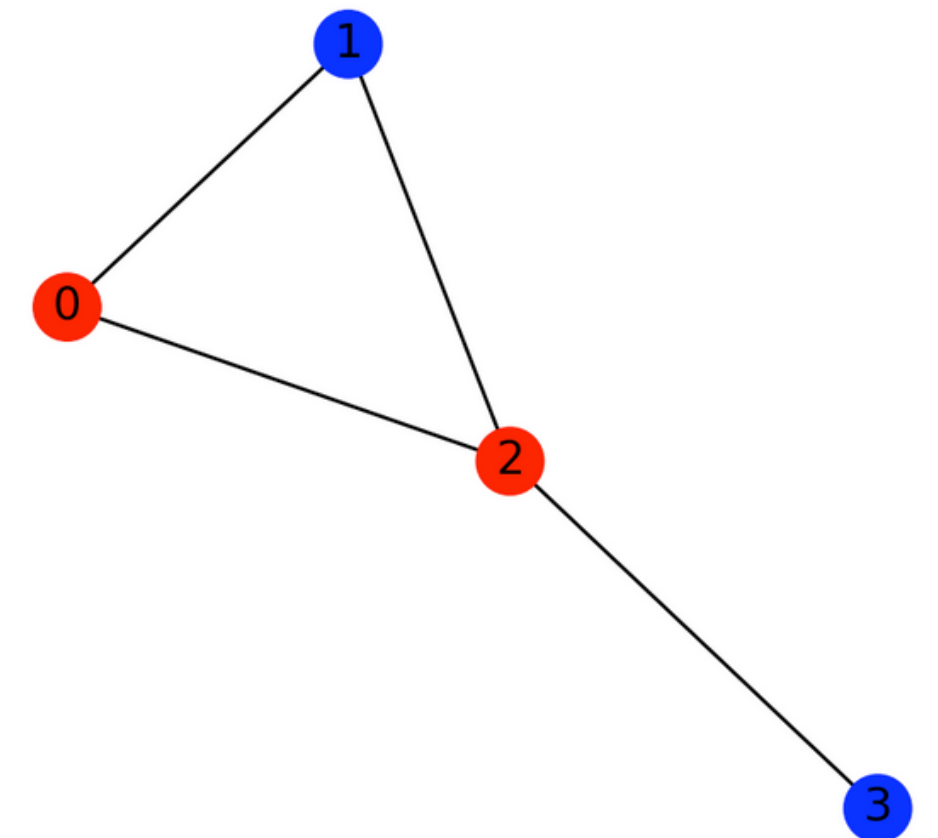
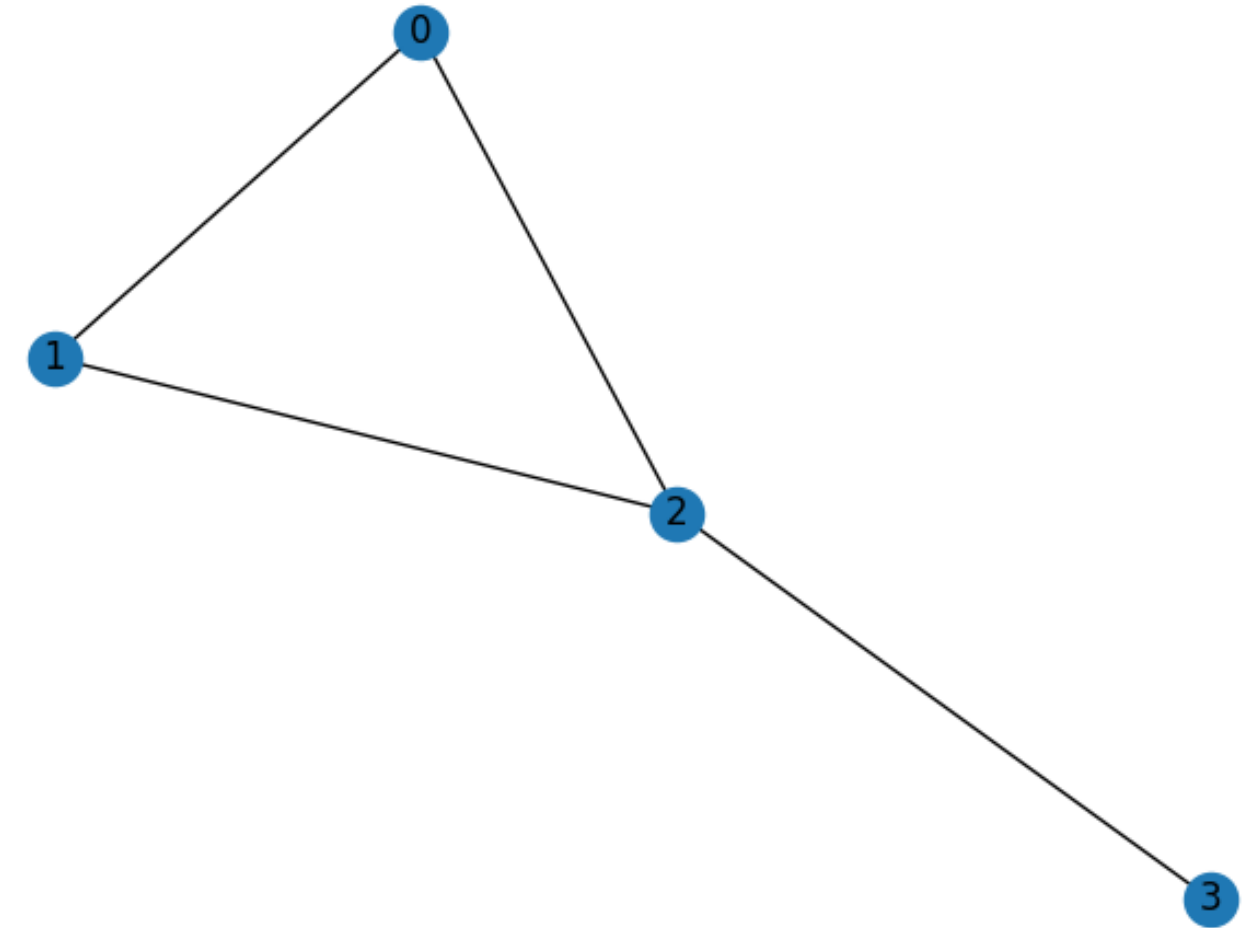
# VERTEX COVER

Soit  $G=(V,E)$  un graphe non orienté, où  $V$  est l'ensemble des sommets et  $E$  est l'ensemble des arêtes. Un ensemble  $C \subseteq V$  est une couverture de sommets de  $G$  si, pour chaque arête  $e$  dans  $E$ , au moins l'un des extrémités de  $e$  appartient à  $C$ .

Mathématiquement, pour chaque arête  $e=(u,v)$  dans  $E$ , soit  $u$  ou  $v$  (ou les deux) appartient à  $C$ . On peut exprimer cela comme suit :

$$\forall e=(u,v) \in E, u \in C \text{ ou } v \in C$$

Un vertex cover minimum est une couverture de sommets de taille minimale. Formellement, si  $C^*$  est une couverture de sommets de taille minimale, alors  $|C^*|$  est la taille du vertex cover minimum.



À VOUS DE JOUER !

$$H_A = A \sum_{uv \in E} (1 - x_u)(1 - x_v) \quad \longrightarrow$$

$$H_B = B \sum_v (x_v) \quad \longrightarrow$$

À VOUS DE JOUER !

$$H_A = A \sum_{uv \in E} (1 - x_u)(1 - x_v) \quad \longrightarrow \quad H_A = A \sum_{uv \in E} (\sigma_u^z \sigma_v^z) + A \sum_{uv \in E} (\sigma_u^z) + A \sum_{uv \in E} (\sigma_v^z)$$

$$H_B = B \sum_v (x_v) \quad \longrightarrow$$

À VOUS DE JOUER !

$$H_A = A \sum_{uv \in E} (1 - x_u)(1 - x_v) \quad \longrightarrow \quad H_A = A \sum_{uv \in E} (\sigma_u^z \sigma_v^z) + A \sum_{uv \in E} (\sigma_u^z) + A \sum_{uv \in E} (\sigma_v^z)$$

$$H_B = B \sum_v (x_v) \quad \longrightarrow \quad H_B = B \sum_v (\sigma_v^z)$$

À VOUS DE JOUER !

<https://github.com/AntoineLemelin/exercice-GT1755>

$$H_A = A \sum_{uv \in E} (1 - x_u)(1 - x_v) \longrightarrow H_A = A \sum_{uv \in E} (\sigma_u^z \sigma_v^z) + A \sum_{uv \in E} (\sigma_u^z) + A \sum_{uv \in E} (\sigma_v^z)$$

$$H_B = B \sum_v (x_v) \longrightarrow H_B = B \sum_v (\sigma_v^z)$$

B doit être inférieur à A

$$B < A$$

# MON SUJET DE STAGE

Comment faire en sorte que nous n'ayons pas à recréer un Hamiltonian a chaque problème?

Les étapes :

1. Benchmark pour pouvoir avoir un baseline
2. Extraire mathématiquement des resemblances
3. Mathématiquement essayer
4. Tester sur un simulateur
5. Tester sur une machine réel

# LES PROBLÈMES DES IMPLÉMENTATIONS

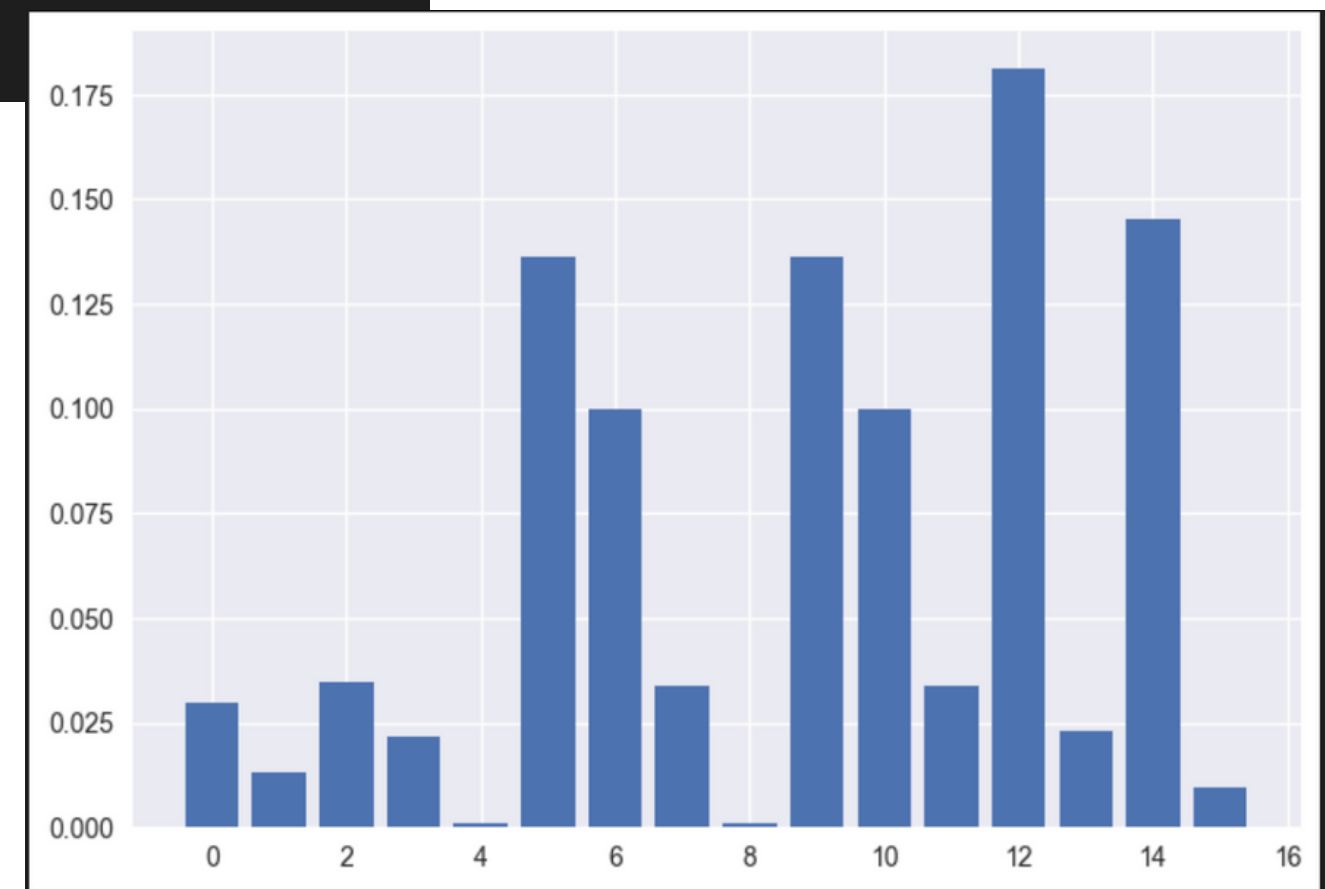
## IBM (QISKIT)

```
Offset: 4.0
Ising Hamiltonian:
0.5 * IIIZ
+ 0.5 * IIZI
+ 1.0 * IZII
+ 0.5 * IIZZ
+ 0.5 * IZIZ
+ 0.5 * IZZI
+ 0.5 * ZZII
```

SamplingMinimumEigensolverResult:  
Eigenvalue: -1.9993169219115816  
Best measurement  
: {'state': 5, 'bitstring': '0101', 'va

## PennyLane

```
Cost Hamiltonian (0.5) [Z0]
+ (0.5) [Z1]
+ (1.0) [Z2]
+ (0.5) [Z0 Z1]
+ (0.5) [Z0 Z2]
+ (0.5) [Z1 Z2]
+ (0.5) [Z2 Z3]
```





# LA THÉORIE VS LA PRATIQUE

En théorie, même si les coefficients ne sont pas les mêmes, mais que nous conservons le même ordre de grandeur, l'hamiltonien devrait s'évaluer de la même manière.

Dans le cas présent, nous dépendons des optimiseurs et des choix d'implémentation de chaque compagnie, ce qui nous restreint énormément.

Bref faites attentions quand vous implémenter des Hamiltoniens vous n'êtes pas toujours le seul fautif si ça ne fonctionne pas bien.

# RÉFÉRENCE

1. [https://pennylane.ai/qml/demos/tutorial\\_qaoa\\_intro/](https://pennylane.ai/qml/demos/tutorial_qaoa_intro/)
2. <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fphy.2014.00005/full>
3. [https://www.pennylane.ai/qml/demos/tutorial\\_isingmodel\\_PyTorch/](https://www.pennylane.ai/qml/demos/tutorial_isingmodel_PyTorch/)
4. <https://www.physique.usherbrooke.ca/blais/wp-content/uploads/2021/10/PHQ330-MQII.pdf>